

Jan-Peter Löwenau
Diss. Frankfurt 1983



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Zur Intensitätsabhängigkeit der optischen Konstanten
von hochangeregten Halbleitern

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

in Frankfurt am Main

von

Jan-Peter Löwenau

aus Heiligenhafen

Frankfurt am Main

Juli 1983

Dekan Prof.Dr. F. Granzer
1. Berichterstatter: Prof.Dr. H. Haug
2. Berichterstatter: Prof.Dr. R.J. Jelitto
Tag der Promotion: 8.11.1983

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	3
1.1 Motivation	3
1.2 Übersicht	5
2. Experimentelle Befunde	7
2.1 Intensitätsabhängigkeit von Absorption und Brechungsindex	7
2.2 Optische Bistabilität	15
3. Theorie der komplexen optischen dielektrischen Funktion	20
3.1 Zweibandmodell	20
3.2 Vielteilchentheorie der Interband-Polarisationsfunktion	26
3.2.1 Grundlagen	28
3.2.2 Quasistatische Näherung	35
4. Lokalfeldkorrekturen	44
4.1 Longitudinale dielektrische Funktion des homogenen Elektronengases	44
4.2 Lösung der Bethe-Salpeter-Gleichung für die Intraband-Polarisationsfunktion in statisch abgeschirmter Hartree-Fock-Näherung	48
5. Lösung der Bethe-Salpeter-Gleichung für die Interband-Polarisationsfunktion	54



6. Theoretische Ergebnisse	62
6.1 Direkte Halbleiter	63
6.2 Zeitaufgelöste Spektren	76
6.3 Ionisation des direkten Exzitons in Germanium	80
7. Anhang	85
A Zusammenstellung der verwendeten Materialparameter	85
B Fortran-Programm zur Lösung der Integralgleichung für die Interband-Polarisationsfunktion	86
Referenzen	92
Danksagungen	105
Lebenslauf	106

1.1 MOTIVATION

Angeregt durch die Beobachtung der optischen Bistabilität, ist das Interesse an nichtlinearen optischen Prozessen in hochangeregten Halbleitern in den letzten Jahren sprunghaft gestiegen. Die Fortschritte, die auf dem Gebiet der nichtlinearen Optik erzielt wurden, sind hinsichtlich der praktischen Anwendung, wie z.B. der Konstruktion von äußerst schnellen Schaltelementen in der integrierten Optik, von großer Bedeutung für die Zukunft.

Während die bekannten elektrischen Eigenschaften von Halbleitern mit der thermischen Anregung von Elektronen zusammenhängen, basieren die optischen Eigenschaften von Halbleitern auf der Anregung von Elektronen durch Licht. Unter Absorption eines oder mehrerer Photonen gehen Elektronen vom gefüllten Valenz- ins leere Leitungsband über und lassen dabei Elektronenfehlstellen, die sog. Löcher, zurück. Während diese Elektron-Loch-Paaranregungen bei kleinen Lichtintensitäten vorwiegend in Form gebundener Zustände vorliegen, kommt es bei hohen Lichtintensitäten zur Ausbildung eines quasimetallischen Elektron-Loch-Plasmas. Mit dem jeweiligen Anregungszustand sind dabei charakteristische optische Spektren verknüpft; die optischen Konstanten hängen also selbst von der Lichtintensität ab.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, eine Berechnung der Ein-Photonen-Absorption von Halbleitern vorzulegen, die für beliebige Anregungsintensitäten gültig ist. Sie basiert auf der numerischen Auswertung einer Theorie, in

der die asymptotisch wichtigsten Vielteilchenprozesse konsistent zusammengefaßt sind. Im direkten Vergleich von Theorie und Experiment ergibt sich eine gute Übereinstimmung.

1.2 ÜBERSICHT

In dieser Arbeit wird mit Methoden der Vielteilchentheorie, losgelöst von störungstheoretischen Methoden, die komplexe nichtlineare Interband-Polarisationsfunktion von Halbleitern berechnet. Aus deren Kenntnis folgen dann sofort die optischen Konstanten. Im Rahmen der u.a. in unserer Gruppe von Haug, Tran und Schmitt-Rink entwickelten Theorie wird die Bethe-Salpeter-Gleichung für die Interband-Polarisationsfunktion in einer quasistatisch abgeschirmten Leiternäherung numerisch gelöst. Vielteilcheneffekte werden dabei in Form von Bandauffüllung, Bandkantenverschiebung und Vertexkorrekturen berücksichtigt [1-3].

Im Gegensatz zu früheren Theorien erlaubt diese Theorie die intensitätsabhängige Änderung direkt anzugeben. Man ist also nicht gezwungen, die Kramers-Kronig-Relationen anzuwenden. Wie die berechneten Spektren zeigen, werden intensitätsabhängige Vielteilcheneffekte, wie beispielsweise die Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung, bei Frequenzen oberhalb der Bandkante unwirksam, d.h. die intensitätsabhängigen Änderungen der optischen Konstanten sind immer auf den spektralen Bereich um die Bandkante beschränkt.

Diese Arbeit gliedert sich im einzelnen wie folgt: Nachdem in den ersten beiden Abschnitten eine knappe Übersicht über die intrinsischen Elektron-Loch-Paarzustände von Halbleitern sowie über die wichtigsten experimentellen Befunde gegeben wird, folgt in Kapitel 3 die Vorstellung der Theorie der komplexen optischen dielektrischen Funktion. Basierend auf dem Zweibandmodell wird mit Hilfe der Vielteilchentheorie die Bethe-Salpeter-Gleichung für die Interband-Polarisationsfunktion hergeleitet. In den letzten beiden Abschnitten dieses Kapitels werden einige Grundlagen sowie die quasistatische Näherung unter Berücksichtigung dyna-

mischer Korrekturen erläutert. Kapitel 4 behandelt die Berechnung von Lokalfeldkorrekturen, wobei die Bethe-Salpeter-Gleichung für die Intraband-Polarisationsfunktion im Rahmen der statisch abgeschirmten Hartree-Fock-Näherung numerisch gelöst wird. In Kapitel 5 wird ausführlich die Lösung der Bethe-Salpeter-Gleichung für die Interband-Polarisationsfunktion geschildert. Dabei wird eine Integral-Gleichung für die Interband-Polarisationsfunktion aufgestellt, die mit Hilfe einer Matrixinversion gelöst wird.

Kapitel 6 enthält schließlich die theoretischen Ergebnisse zur Intensitätsabhängigkeit der optischen Konstanten von Halbleitern, wobei ein systematischer Vergleich zwischen Experiment und Theorie durchgeführt wird. Am Beispiel von GaAs werden zeitaufgelöste Spektren im Nanosekundenbereich diskutiert. Ferner wird die Ionisation des direkten Exzitons in Germanium behandelt. Die theoretischen Ergebnisse erlauben es, die im Experiment beobachteten intensitätsabhängigen Änderungen von Brechungsindex und Absorptionskoeffizient für beliebige Anregungsintensitäten zu erklären. Dabei zeigt sich eine gute Übereinstimmung. Die Absorptionsspektren lassen sich sehr genau anpassen und liefern die zum Problem des Mottübergangs gehörenden kritischen Ionisationsdichten für Germanium.

Darüber hinaus lassen sich wichtige Aussagen zu der bisher in direkten Halbleitern beobachteten optischen Bistabilität machen. So lassen sich die dominante Nichtlinearität in GaAs mit der Ionisation des Exzitons und die dominante Nichtlinearität in InSb mit Sättigungseffekten (Bandauffüllung) in Verbindung bringen.

2. EXPERIMENTELLE BEFUNDE

2.1 INTENSITÄTSABHÄNGIGKEIT VON ABSORPTION UND BRECHUNGSINDEX

Bei der Untersuchung der verschiedenen physikalischen Erscheinungen in hochangeregten Halbleitern ergeben sich neue Fragestellungen. Von Interesse ist zum einen, wie sich charakteristische Größen des Halbleiters (z.B. Bandstruktur, Exzitonenbindungsenergie) mit steigender Lichtintensität verändern und zum anderen, welche optischen Eigenschaften sich bei der wachsenden Lichtintensität ausbilden. Der Schilderung der entsprechenden experimentellen Befunde sollen im folgenden einige grundlegende Betrachtungen vorangestellt werden. Anschließend findet die Diskussion der Intensitätsabhängigkeit der optischen Konstanten sowie der optischen Bistabilität statt.

Zur Beschreibung der nichtlinearen optischen Prozesse ist die Kenntnis der intrinsischen Anregungszustände eines Halbleiters notwendig. Die optisch erzeugten Anregungszustände lassen sich generell in gebundene und freie Anregungen einteilen. Gebundene Zustände werden als Exzitonen bezeichnet [4-6]. Exzitonen stellen im schwach angeregten Kristall die energetisch niedrigsten elektronischen Elementaranregungen dar und beeinflussen deshalb maßgeblich die optischen Spektren im Bandkantenbereich [7-9]. Ihr Energiespektrum besteht neben einer Folge von diskreten Bindungszuständen aus einem Kontinuum von Streuzuständen, ähnlich den Anregungszuständen des Wasserstoffatoms ($1S, 2S, \dots$). Durch optische Übergänge vom Grundzustand in die erwähnten Anregungszustände kann der Halbleiter Licht absorbieren.

Im Grenzfall kleiner Lichtintensitäten äußert sich der stattfindende Übergang (beispielsweise in den 1S-Zustand) als ausgeprägte Struktur im Absorptions- bzw. Brechungsindexspektrum an der Bandkante. Besonders stark ist diese Struktur in direkten Halbleitern ausgeprägt, da in diesem Fall optische Übergänge ohne Phononen möglich sind. Dies führt zu hohen Übergangswahrscheinlichkeiten.

Mit wachsender Lichtintensität werden mehr und mehr Elektron-Loch- Paare angeregt. Diese schirmen die attraktive Coulomb-Wechselwirkung ab und bewirken somit eine Polarisierung bzw. Ionisation des Exzitons [10,11]. Damit direkt verknüpft sind starke intensitätsabhängige Änderungen der optischen Konstanten. Die Dichte, bei der die Exzitonenbindungsenergie verschwindet, bezeichnet man als Mottdichte [12,13].

Bei sehr hohen Lichtintensitäten besteht der Anregungszustand aus einem Kollektiv von stark wechselwirkenden Elektronen und Löchern; aus einem Gas von Exzitonen und freien Elektron-Loch-Paaren hat sich ein sog. Elektron-Loch-Plasma gebildet. Es ist eine bekannte Tatsache , daß auf Grund der hohen Konzentration von Elektron-Loch-Paaren die Eigenschaften des Halbleiters nun auch selbst merklich beeinflußt werden. Austausch- und Korrelationseffekte führen zu einer Absenkung der Bandkante. Gleichzeitig findet die sog. Bandauffüllung statt. Diese kann in indirekten Halbleitern zu optischen Verstärkungsfaktoren (Gain) bis 10^4 cm^{-1} führen [14-21].

In Halbleitern mit großer Bandlücke lassen sich bei kleinen Anregungsdichten neben den Exzitonen auch Exzitonen-Moleküle beobachten. Mit ihnen sind ebenfalls charakteristische optische Prozesse verknüpft. Abbildung 1 gibt einen Überblick über die wichtigsten Halbleiter-Materialien und die verschiedenen Anregungszustände, die in ihnen beobachtet werden können.

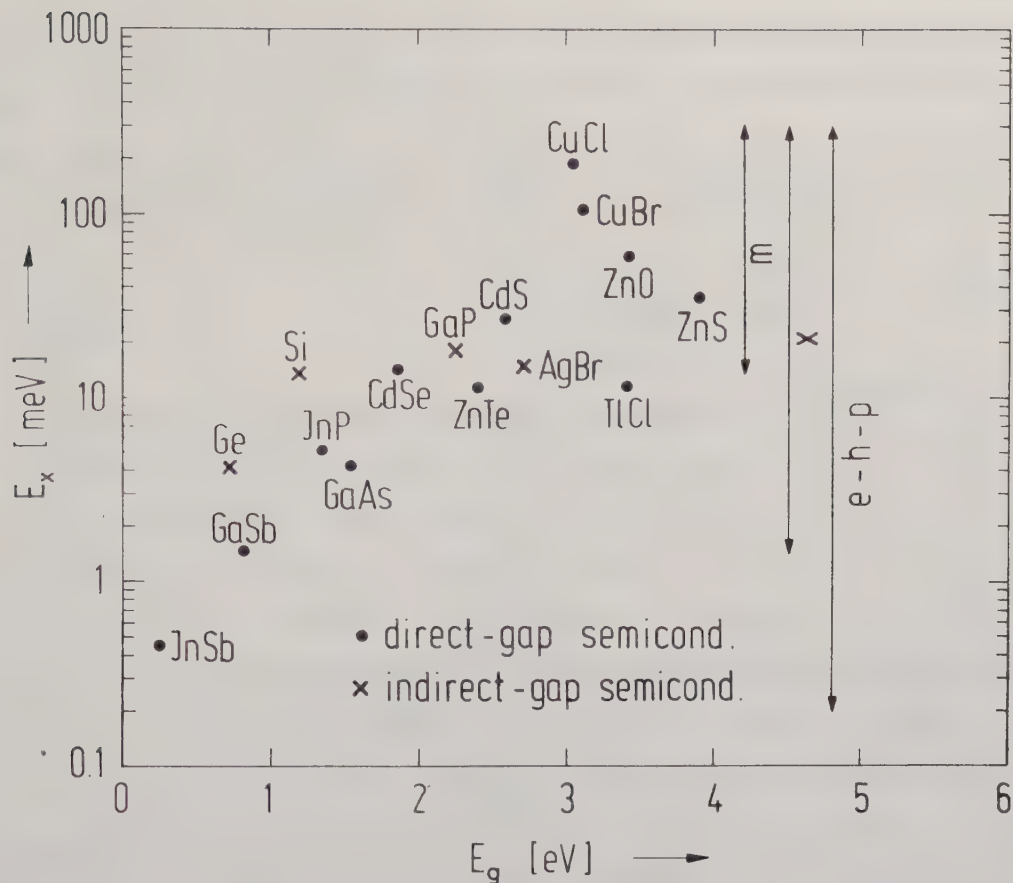


Abbildung 1. : Aufgetragen sind experimentelle Exzitonenbindungsenergie E_x und Bandkantenenergie E_g . Die Pfeile markieren die Bereiche, in denen Moleküle (m), Exzitonen (x) und Elektron-Loch-Plasmen (e-h-p) beobachtet werden können.

Experimentelle Aussagen zu den optischen Eigenschaften von Halbleiterkristallen resultieren fast ausschließlich aus Absorptions- und Brechungsindexmessungen. Im folgenden wird, stellvertretend für alle direkten Halbleiter, am Beispiel von GaAs und CdS die Intensitätsabhängigkeit von Absorption und Brechungsindex diskutiert. In beiden Fällen werden wegen der intensitätsabhängigen Polarisation des Mediums unterhalb des 1S-Exzitons große nichtlineare Effekte beobachtet [22-26]. Speziell bei der Interpretation der bisher beobachteten optischen Bistabilität sind sie von dominanter Bedeutung (siehe Abschnitt 2.2).

Bei den Absorptions-Experimenten mißt man im allgemeinen das Intensitätsverhältnis von einfallendem und transmittiertem Licht als Funktion der Anregungsfrequenz. Dann kann bei bekannter Probendicke d aus der Transmission I_T/I_0 die Absorptionskonstante wie folgt bestimmt werden:

$$\alpha(\omega) \approx \frac{1}{d} \log \frac{I_0(\omega)}{I_T(\omega)} \quad (2.1)$$

Abbildung 2 zeigt ein aus solchen Transmissionsmessungen gewonnenes typisches Absorptionsspektrum für GaAs [25]. Wie man deutlich erkennt, dominieren im Grenzfall kleiner Lichtintensitäten (gepunktete Kurve) vorwiegend die gebundenen Elektron-Loch-Paare. Neben der ausgeprägten Exzitonenstruktur sieht man oberhalb der Bandkante ($\approx 1.52\text{eV}$) die Kontinuumszustände. Die energetische Lage des Exzitons bleibt relativ lange unempfindlich gegen eine Intensitätserhöhung. Dieser experimentelle Befund, der direkt die elektrische Neutralität eines Exzitons widerspiegelt, kann offenbar nur dadurch erklärt werden, daß sich die Änderungen von Bindungsenergie und Bandkante bis zur kritischen Dichte, der Mottdichte, exakt kompensieren [27-29]. Parallel zur Abnahme der Bindungsenergie erwartet man mit wachsender Ladungsträgerkonzentration eine Abnahme der Oszillatorstärke und eine Zunahme der Dämpfung des Exzitons. Bei der Intensität von $I=500\text{ W/cm}^2$ (durchgezogene Kurve) ist das Exziton ionisiert und im Absorptionskontinuum verschwunden.

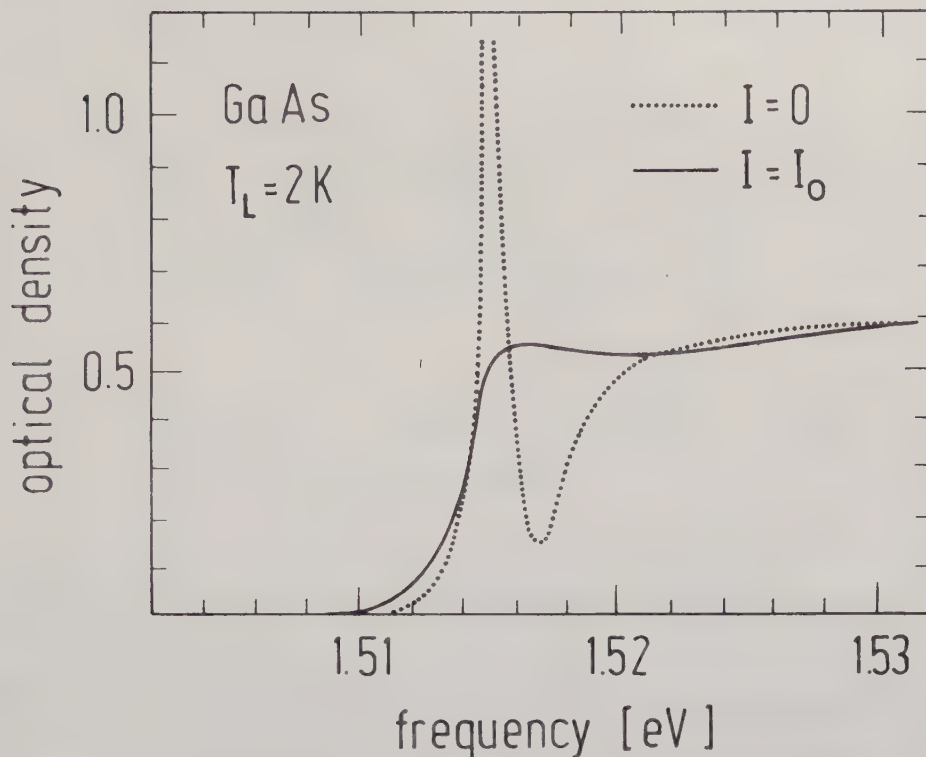


Abbildung 2. : Experimentelle Absorptionsspektren von GaAs bei einer Gittertemperatur von $T_L=2K$ bei fehlender Anregung und bei Hochanregung. Die durchgezogene Kurve ist oberhalb der Motttdichte (lt. Ref. 25).

Abbildung 3 zeigt einige Reflexionsspektren, wie sie sich für CdS bei $T=60K$ ergeben [30]. In diesem Fall beobachtet man zwei Exzitonen, das A- und das B-Exziton. Man erkennt, wie bereits an den Absorptionsspektren diskutiert, die ausgeprägten Strukturen unterhalb der Bandkante. Oberhalb der Bandkante beobachtet man ein kontinuierliches Spektrum. Die gestrichelte Kurve zeigt das Spektrum bei verschwindender Anregungsintensität, während die durchgezogene Kurve (Anregungsintensität $I=10KW/cm^2$) das Reflexionsspektrum bei gleicher Temperatur in der Nähe des Mottübergangs beschreibt. Man sieht, daß mit wachsender Anregungsintensität die exzitonischen Anteile allmählich zurückgehen und gleichzeitig verbreitert werden.

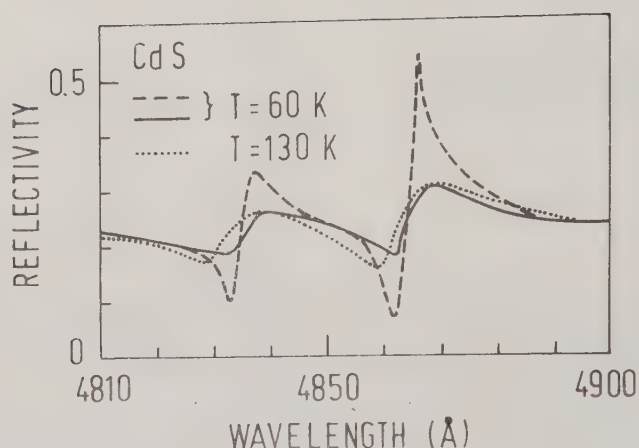


Abbildung 3. : Reflexion von CdS im Bereich des A- und B-Exzitons. Die gestrichelte Kurve zeigt das Reflexionsspektrum bei $T=60\text{ K}$ ohne zusätzliche Lichteinstrahlung, die durchgezogene Kurve bei zusätzlicher Bestrahlung mit einer Intensität von 10 KW/cm^2 (lt. Ref. 30).

Wie weiter zu erkennen ist, treten mit ansteigender Lichtintensität z.B. unterhalb des A-Exzitons (bei 4870 Å) große dispersive Änderungen auf. In diesem Fall sind diese immer negativ und bei einer bestimmten Frequenz maximal. Neuere Experimente von Klingshirn et al. [31] und Müller et al. [32] liefern erstmals direkte Daten für die intensitätsabhängigen Änderungen des Brechungsindex unterhalb der A-Exzitonresonanz. Die für CdS gewonnenen Ergebnisse sind in Abbildung 4 dargestellt. Das Spektrum zeigt den Brechungsindex bei fehlender (gepunktete Kurve, $I=0$), bei mittlerer (strichpunktierte Kurve, $I=60\text{ KW/cm}^2$) und bei hoher Anregungsintensität (durchgezogene Kurve, $I=1000\text{ KW/cm}^2$).

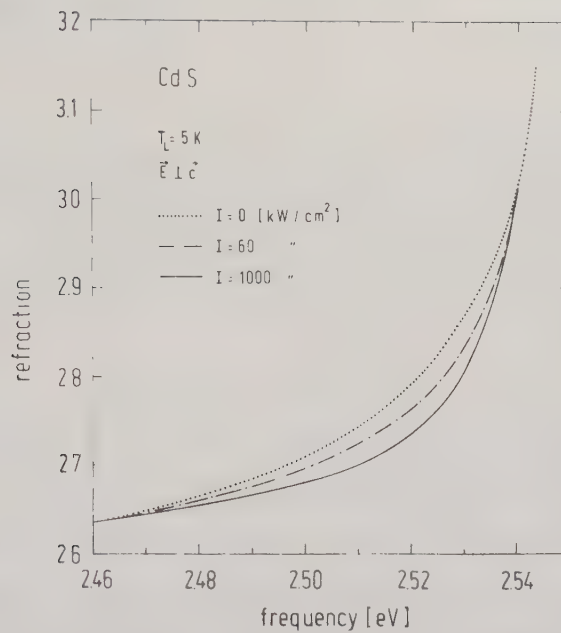


Abbildung 4. : Experimentelles Brechungsindexspektrum von CdS bei einer Gittertemperatur von $T_L=5\text{K}$ für verschiedene Anregungsintensitäten. Die Hochanregungskurve (durchgezogene Linie) ist oberhalb der Motttdichte (lt. Ref. 31).

Auch hier erkennt man unterhalb der Exzitonenresonanz starke dispersive Änderungen, die mit wachsender Anregungsintensität ausgeprägter werden und mit denen, wie sich später zeigen wird, die optische Bistabilität direkt verknüpft ist. Dieses Verhalten zeigt sich praktisch bei allen optisch angeregten direkten Halbleitern [33,34].

Aus den optischen Spektren in Abbildung 2 und Abbildung 3 ist ferner zu entnehmen, daß die exzitoniche Verstärkung nur im niederenergetischen Bereich von der Anregungsintensität abhängt. Dies läßt sich darauf zurückführen, daß die Abschirmung für Ladungsträger mit hoher kinetischer Energie nicht mehr wirksam werden kann.

Eine ausführlichere Beschreibung der Ionisation des Exzitons in Germanium schließt sich in Kap. 6.3 an.

2.2 OPTISCHE BISTABILITÄT

Seit der ersten experimentellen Beobachtung (1979) der optischen Bistabilität in den direkten Halbleitern GaAs [35] und InSb [36] haben sich zahlreiche Arbeiten mit diesem nichtlinearen optischen Phänomen beschäftigt [37,38].

Die physikalischen Prinzipien der optischen Bistabilität beruhen bekanntlich auf der Tatsache, daß optische Systeme mit einer intensitätsabhängigen Polarisation zwei unterschiedliche stabile Transmissions-Zustände für die gleiche eingestrahlte Lichtintensität besitzen können und daß daher optisch bistabiles Verhalten auftritt. Im Experiment beobachtet man eine sprunghafte Änderung der transmittierten Lichtintensität beim Durchgang des einfallenden Lichtfeldes durch einen mit einem optisch nichtlinearen Medium gefüllten Fabry-Perot-Resonator.

Der oben geschilderte Prozeß ist am einfachsten zu verstehen, wenn man die Kennlinie eines Resonators betrachtet. Schematisch ist sie in Abbildung 5 dargestellt. Wie man deutlich erkennt, erfährt die normale lineare Relation zwischen Eingangs- und Ausgangsintensität (gestrichelte Linie) drastische Änderungen im nichtlinearen Fall.

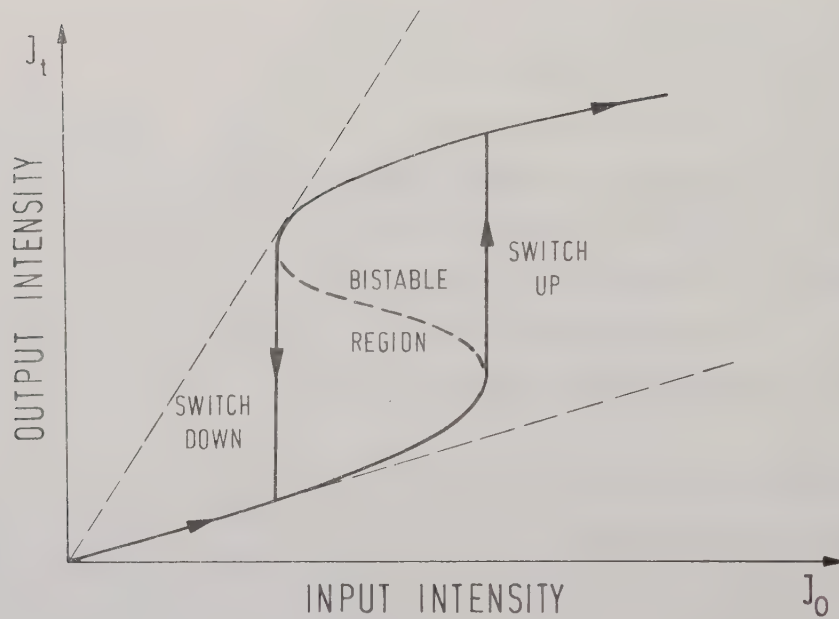
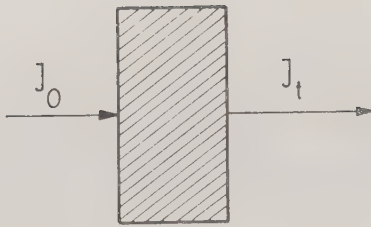


Abbildung 5. : Schematische Darstellung eines Experiments in dem optische Bistabilität beobachtet wird. Die gestrichelten Linien zeigen den linearen Bereich an.

Wenn die vielfach reflektierten Wellen im Resonator destruktiv interferieren, ist die Intensität I_T des transmittierten Lichtes klein. Mit ansteigender Intensität des Eingangslichtfeldes I_0 ändern sich die dielektrischen Eigenschaften des Mediums (Variation des Brechungsindex sowie des Absorptionskoeffizienten mit der Wellenlänge), so daß die

reflektierten Wellen im Resonator mehr und mehr konstruktiv interferieren.

Abbildung 5 zeigt, wie dieser wirkungsvolle Mechanismus mit einem graduellen Anstieg der Ausgangsintensität beginnt. Erreicht die Eingangsintensität einen bestimmten oberen kritischen Wert, wird der untere Transmissionsast instabil und die Ausgangsintensität springt auf den oberen Transmissionsast. Bei Verringerung der Eingangsintensität I_0 fällt die Ausgangsintensität nicht direkt wieder auf den unteren Transmissionsast zurück, sondern sie bleibt bis zu einem bestimmten unteren kritischen Wert auf dem oberen Transmissionsast und springt dann auf den unteren Ast. In der Region zwischen den beiden kritischen Werten existieren zwei stabile Zustände für eine gegebene Eingangsintensität. Die sprunghaften Übergänge an den beiden Kanten der bistabilen Region zeigen deutliche Hystereseeffekte. Die Koexistenz von zwei stabilen Zuständen ist charakteristisch für die optische Bistabilität, was auch durch die experimentellen Befunde (z.B. GaAs, InSb) gedeckt wird.

Sowohl GaAs als auch InSb sind direkte Halbleiter aus der Gruppe der III-V Verbindungen. In beiden Materialien sind große Änderungen des Absorptionskoeffizienten als auch des Brechungsindex in Bandkantennähe zu beobachten. Obwohl die Halbleiter GaAs und InSb in enger Beziehung zueinander stehen, können die physikalischen Eigenschaften der optischen Spektren (besonders bei tiefen Temperaturen) unterhalb der Bandkante völlig verschieden sein. So besteht der gravierende Unterschied, daß die Exzitonenbindungsenergien sehr verschieden sind. In InSb ist sie viel kleiner als in GaAs, so daß das Exziton in InSb bereits immer ionisiert bzw. nie aufgelöst ist. Wie im letzten Abschnitt erwähnt, sind dem gegenüber in GaAs die Exzitonenlinien sehr ausgeprägt.

Vor diesem Hintergrund ist die optische Bistabilität in GaAs mit der Ionisation des Exzitons verbunden, Während bei InSb Bandfülleffekte (Sättigungseffekte) für den nichtlinearen Effekt verantwortlich sind.

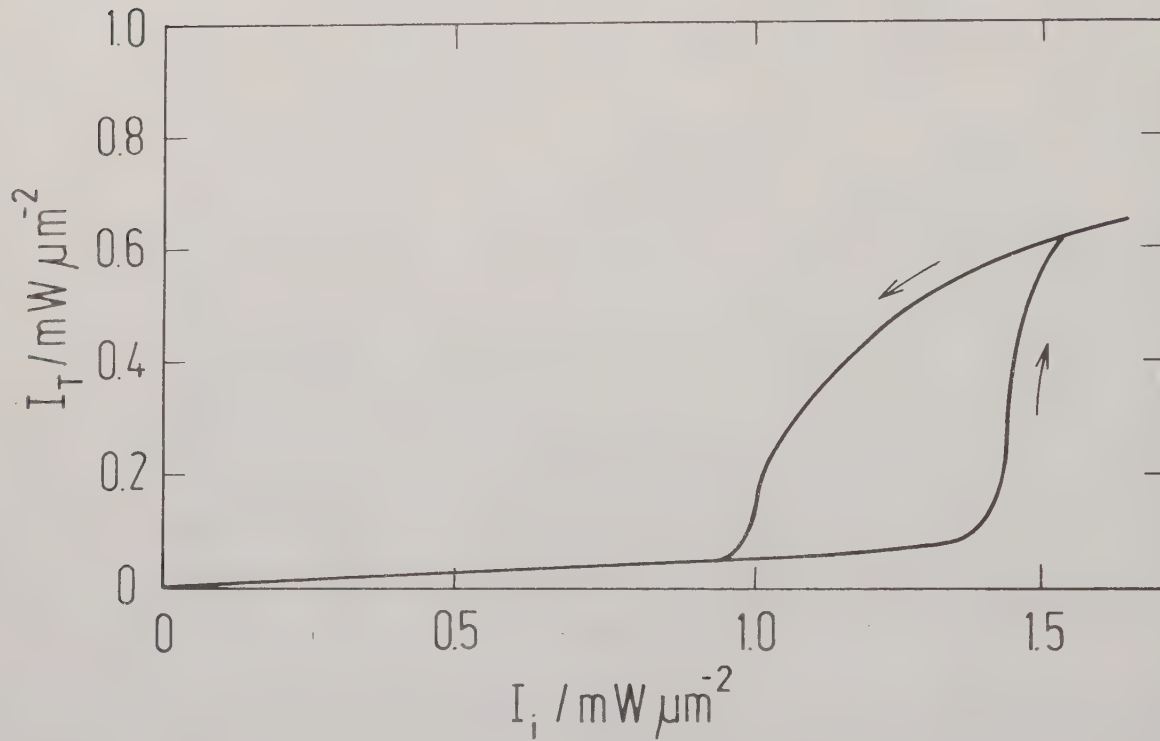


Abbildung 6. : Experimentelle Messungen der optischen Bistabilität in GaAs bei Temperatur von $T=15\text{K}$. I_T ist die Lichtintensität des transmittierten Lichtes und I_i die Lichtintensität des eingestrahlten Lichtes (lt. Ref. 35).

Abbildung 6 und Abbildung 7 zeigen die aus Transmissionsmessungen gewonnenen Resultate für GaAs [35] und InSb [36]. In beiden Fällen ist wegen der relativ kleinen Exzitonenbindungsenergie nur eine kleine Eingangsintensität nötig, um optisch bistabiles Verhalten anzuzeigen.

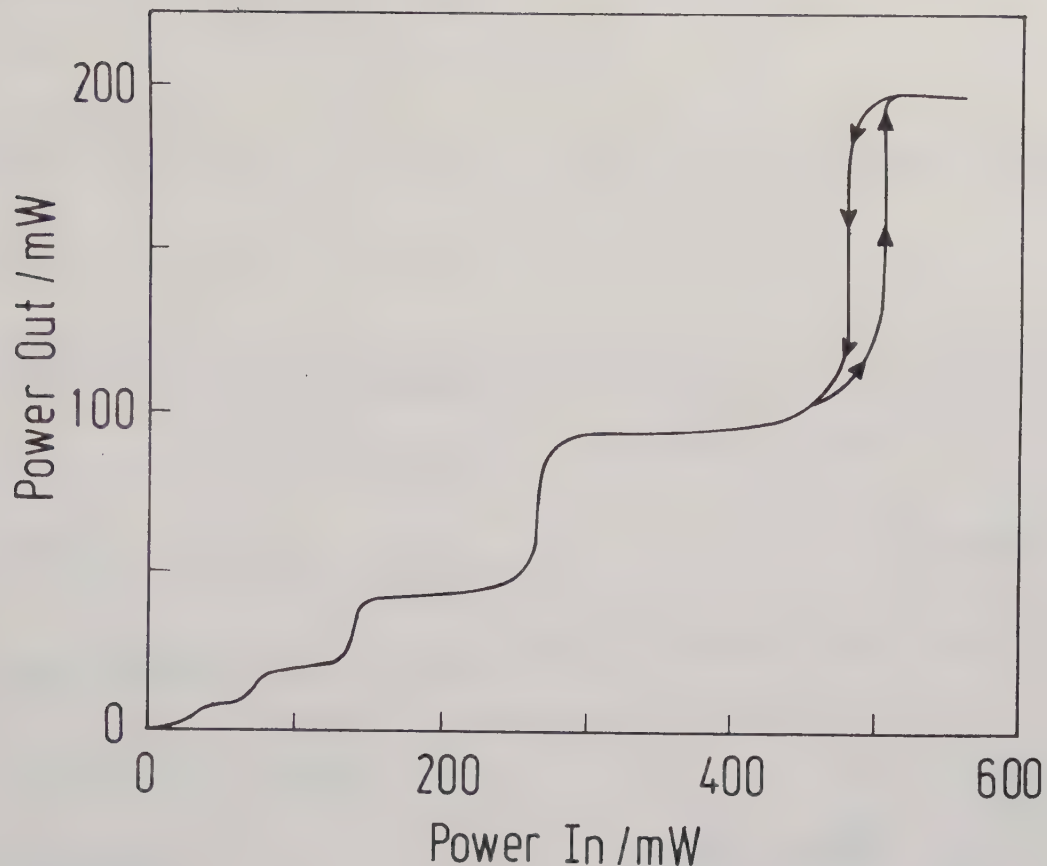


Abbildung 7. : Experimentelle Messungen der optischen Bistabilität in InSb bei einer Temperatur von $T=15\text{K}$ (lt. Ref. 36).

Die experimentellen Erfolge bei der optischen Bistabilität legen es nahe, die Möglichkeit einer späteren Anwendung als optisches Schaltelement in der integrierten Optik in Betracht zu ziehen. Die Vorteile bei der Verwendung optischer Schaltelemente liegen in den kurzen Schaltzeiten und in dem geringen Energieaufwand, der erforderlich ist, um solche Schaltungen durchzuführen. Trotzdem ist zur Zeit noch nicht an eine kurzfristige technologische Anwendung zu denken. Weitere Forschungen sind auf diesem Gebiete noch erforderlich.

3. THEORIE DER KOMPLEXEN OPTISCHEN DIELEKTRISCHEN FUNKTION

3.1 ZWEIBANDMODELL

Der Hamiltonoperator eines Systems von Elektronen im räumlich periodischen Gitterpotential $V(\vec{r})$ und unter dem Einfluß eines äußeren periodischen elektromagnetischen Feldes ist gegeben durch

$$H = H_0 + H' \quad (3.1)$$

H_0 beschreibt die Elektronen im Gitterpotential und ihre gegenseitige Wechselwirkung, H' repräsentiert die von außen aufgeprägte Störung. In der Dipoleichung gilt

$$H' = - \int d^3r \vec{P}(\vec{r}) \cdot \vec{E}(\vec{r}), \quad (3.2)$$

wobei $\vec{P}(\vec{r})$ das Dipolmoment ist. Die Störung (3.2) induziert eine Polarisation

(3.3)

$$\langle \vec{P}(\vec{r}) \rangle = \langle \vec{P}(\vec{r}) \rangle_0 + \iint d^3r' dt' \hat{\alpha}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \cdot \vec{E}(\vec{r}', t').$$

Hierbei ist

$$\hat{\alpha}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = - \langle \langle \vec{P}(\vec{r}, t), \vec{P}(\vec{r}', t') \rangle \rangle \quad (3.4)$$

der dielektrische Polarisationstensor eines Systems von elektrischen Dipolen. $\langle \vec{P}(\vec{r}) \rangle_0$ ist die Polarisation im Gleichgewichtszustand, sie kann

beispielsweise von Null verschieden sein für Ferroelektrika. Der Erwartungswert «....;....» ist folgendermaßen definiert [39]:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = -i \theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \quad (3.5)$$

Für die Fouriertransformierte von $\hat{\alpha}$ gilt

$$\hat{\alpha}(\vec{q}, \omega) = - \langle\langle \vec{P}(\vec{q}, t); \vec{P}(-\vec{q}) \cdot \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.6)$$

Damit erhält man für die Polarisation

$$\vec{P}(\vec{q}, \omega) = \hat{\alpha}(\vec{q}, \omega) \cdot \vec{E}(\vec{q}, \omega) \quad (3.7)$$

und für die dielektrische Funktion

$$\hat{\epsilon}(\vec{q}, \omega) = 1 + 4\pi \hat{\alpha}(\vec{q}, \omega)$$

bzw. für isotrope Medien

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi}{3} \langle\langle \vec{P}(\vec{q}, t) \cdot; \vec{P}(-\vec{q}) \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.8)$$

Im folgenden werden Ausdrücke für die quantenmechanische Korrelationsfunktion (3.6) hergeleitet und damit die komplexe optische dielektrische Funktion bestimmt. Dazu wird sich auf eine einfache Bandstruktur beschränkt, d.h. man betrachtet einen Modellhalbleiter mit einer isotropen direkten Bandstruktur ohne Bandentartung. Der Einfluß der realen Bandstruktur (Bandentartung, Anisotropie der Bänder) wird in der jeweiligen Auswertung, abhängig von dem betrachteten Halbleiter, berücksichtigt. Das einfachste Bandmodell ist hierbei das Zweibandmodell, das sich mit Hilfe des nachstehenden Hamiltonoperators beschreiben läßt ($\hbar=1$) [40,41]:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{k^2}{2m_0} & \frac{k \cdot p_{vc}}{m_0} \\ \frac{k \cdot p_{cv}}{m_0} & E_g + \frac{k^2}{2m_0} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$p_{vc} = p_{cv}^*$ ist hierbei das Impulsmatrixelement für Übergänge vom Valenz- ins Leitungsband. Es wird als isotrop angenommen.

Die Eigenwerte des $\hat{H}$ (3.9) sind

$$E_{c,v}(k) = \frac{E_g}{2} + \frac{k^2}{2m_0} \pm \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \frac{k^2 |p_{vc}|^2}{m_0^2}} \quad (3.10)$$

Für kleine k ergibt sich die Effektivmassennäherung

$$E_c(k) = E_g + \frac{k^2}{2m_c} \quad (3.11)$$

$$E_v(k) = - \frac{k^2}{2m_v} \quad (3.12)$$

bzw. im Elektron-Loch-Bild

$$(3.13)$$

$$\mathcal{E}_e(k) = E_g + \frac{k^2}{2m_e} = E_g + \frac{k^2}{2m_0} \left(\frac{2|p_{vc}|^2}{m_0 E_g} + 1 \right)$$

$$\mathcal{E}_h(k) = \frac{k^2}{2m_h} = \frac{k^2}{2m_0} \left(\frac{2|p_{vc}|^2}{m_0 E_g} - 1 \right) \quad (3.14)$$

wobei man für die reduzierte Elektron-Loch-Masse

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} = \frac{1}{m_c} - \frac{1}{m_v} = \frac{4|p_{vc}|^2}{m_0^2 E_g} \quad (3.15)$$

erhält. Die Beschreibung der Bandenergie mit Hilfe von effektiven isotropen Massen gilt natürlich nur in der unmittelbaren Umgebung der Bandlücke.

Zum Abschluß dieses Abschnittes wird eine Formel für die optische dielektrische Funktion von direkten Halbleitern im Zweibandmodell aufgestellt. Die Einzelheiten der Projektion von (3.1) in den "Zweiband-Unterraum" bzw. ins Elektron-Loch-Bild (DTA) sind in der Literatur zu finden [42-45]. Danach wird der Dipoloperator $\vec{P}$ in (3.8) nach Paaroperatoren entwickelt. Im Sinne der Dipolnäherung werden nur die Interband-Prozesse berücksichtigt. Unter diesen Bedingungen erhält man für den Dipoloperator im Elektron-Loch-Bild

$$\vec{P}_{vc} = e \sum_{\vec{k}} (\vec{F}_{vc}(\vec{k}) d_{-\vec{k}} c_{\vec{k}} + \vec{F}_{cv}(-\vec{k}) d_{-\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}^+) \quad (3.16)$$

Die Quantenzahl $\vec{k}$ schließt den Spin mit ein. Der Operator $c_{\vec{k}}^+$ erzeugt ein Elektron des Leitungsbandes, $d_{-\vec{k}}^+$ ein Loch des Valenzbandes. Sie sind aus den entsprechenden Blochoperatoren durch den Übergang $c_{k_c} \rightarrow c_{\vec{k}}$ und $c_{k_v} \rightarrow d_{-\vec{k}}^+$ hervorgegangen. $\vec{F}_{vc}(\vec{k})$ ist das optische Dipolmatrixelement mit

$$\vec{F}_{vc}(\vec{k}) = \int_{V_0} d\vec{r} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) \vec{r} u_{c\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.17)$$

und

$$-i \langle v | \vec{F} | c \rangle = \frac{\langle v | \frac{\vec{p}}{m_0} | c \rangle}{E_c - E_v} \quad .$$

Für die optische dielektrische Funktion ergibt sich mit (3.8) und (3.16)

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{4\pi e^2}{3} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (\vec{F}_{vc}(\vec{k}) \vec{F}_{vc}^*(\vec{k}') G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) + c.c.(-\omega)) \quad (3.18)$$

wobei $\frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi}$ die Polarisierbarkeit des Hintergrundes darstellt. Sie repräsentiert die Anteile der optischen dielektrischen Funktion, die im Spektralbereich um die Bandkante außer Resonanz sind.

Aus dem Realteil der optischen dielektrischen Funktion erhält man den Brechungsindex und aus dem Imaginärteil den Absorptionskoeffizienten. Auf die Berechnung der Interband-Polarisationsfunktion G_{eh} wird im nächsten Abschnitt eingegangen. Die graphische Darstellung von (3.18) in der aufsummierten Form ist gegeben durch

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - 4\pi \cdot \left(\text{Diagram of an ellipse with a central rectangle labeled } G_{eh} \text{ and two dots on the horizontal axis} \right) \quad (3.19)$$

Drückt man schließlich H_0 aus Gleichung (3.1) noch durch Elektron und Loch Operatoren aus, so findet man, wenn das Wechselwirkungsmatrixelement näherungsweise durch ein statisch abgeschirmtes Coulomb-Potential ersetzt wird, im Wannier-Grenzfall [46-48]:

$$H_0 = H_{kin} + H_{int} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\vec{k}} \left[\left(E_g + \frac{k^2}{2m_e} \right) c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} + \frac{k^2}{2m_h} d_{\vec{k}}^+ d_{\vec{k}} \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} V(\vec{q}) \left[c_{\vec{k}-\vec{q}}^+ c_{\vec{k}+\vec{q}}^+ c_{\vec{k}} c_{\vec{k}} + d_{\vec{k}-\vec{q}}^+ d_{\vec{k}+\vec{q}}^+ d_{\vec{k}} d_{\vec{k}} \right. \\ &\left. - 2 c_{\vec{k}-\vec{q}}^+ c_{\vec{k}} d_{\vec{k}'}^+ d_{\vec{k}'} \right] \quad (3.21) \end{aligned}$$

mit

$$V(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} . \quad (3.22)$$

Bezüglich dieses Hamiltonoperators ist die Interband-Polarisationsfunktion G_{eh} zu berechnen.

3.2 VIELTEILCHENTHEORIE DER INTERBAND-POLARISATIONSFUNKTION

Ausgangspunkt zur Berechnung der Interband- Polarisationsfunktion kann die Störungstheorie unter Verwendung thermodynamischer Greenfunktionen sein. Demgegenüber soll hier die Berechnung der Interband- Polarisationsfunktion durch Entkopplung der Bewegungsgleichung erfolgen. Für ein detailliertes Studium von Vierpunktfunktionen möge auf die einschlägige Literatur verwiesen sein, in der die Eigenschaften der Paar-Greenfunktion in aller Ausführlichkeit dargestellt sind [1,2,49-51]. Die Interband- Polarisationsfunktion kann hinsichtlich der Paar-Greenfunktion definiert werden als

$$G_{en}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} G_{\vec{q}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) \quad (3.23)$$

$$= \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \ll d_{-\vec{k}}(t) c_{\vec{k}+\vec{q}}(t); c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} d_{-\vec{k}'}^{\dagger} \gg_{\omega} .$$

Die Bewegungsgleichung der Paarfunktion ist dann gegeben durch den Ausdruck

$$i \frac{d}{dt} G_{\vec{q}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = - \delta(t) \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} [f_e(\vec{k}) + f_h(\vec{k}) - 1]$$

$$+ \ll [d_{-\vec{k}}(t) c_{\vec{k}+\vec{q}}(t), H_0]; c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} d_{-\vec{k}'}^{\dagger} \gg \quad (3.24)$$

oder in der Fourierdarstellung

$$G_{\vec{q}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \frac{1 - f_e(\vec{k}) - f_h(\vec{k})}{\omega + i\delta - \epsilon_e(\vec{k} + \vec{q}) - \epsilon_h(-\vec{k})} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} + \frac{\langle\langle [d_{-\vec{k}}(t) c_{\vec{k}}(t), H_{int}] ; c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} d_{-\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} \rangle\rangle}{\omega + i\delta - \epsilon_e(\vec{k} + \vec{q}) - \epsilon_h(-\vec{k})} \quad (3.25)$$

$f_e(\vec{k})$ und $f_h(\vec{k})$ sind die Fermiverteilungen der Elektronen und Löcher und $\epsilon_e(\vec{k})$, $\epsilon_h(\vec{k})$ deren Bandenergien. Der letzte Term beinhaltet bekanntlich Drei-Teilchenfunktionen, die im folgenden in der Hartree-Fock-Näherung (HF) entkoppelt werden. Auf Grund dieser Näherung folgt die Bethe-Salpeter-Gleichung (BSE) für die Interband-Polarisationsfunktion in HF-Näherung. Auf Abschirmeffekte wird in Abschnitt 3.2.2 ausführlich eingegangen.

(3.26)

$$G_{\vec{q}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = G_{\vec{q}}^0(\vec{k}, \vec{k}', \omega) - \sum_{\vec{k}'' \vec{k}'''} G_{\vec{q}}^0(\vec{k}, \vec{k}'', \omega) V(\vec{k}'' - \vec{k}''') \delta_{SS'} G_{\vec{q}}(\vec{k}'', \vec{k}', \omega)$$

$G_{\vec{q}}^0(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$ ist die Paar Korrelationfunktion der unkorrelierten Elektron-Loch-Paare und ist gegeben durch

$$G_{\vec{q}}^0(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \frac{1 - f_e(\vec{k}) - f_h(\vec{k})}{\omega + i\delta - e_e(\vec{k} + \vec{q}) - e_h(\vec{k})} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \quad (3.27)$$

Hierbei sind $e_e(\vec{k})$ und $e_h(\vec{k})$ die renormierten Einteilchenenergien, die den Effekt der Austauschwechselwirkung berücksichtigen, gemäß

$$e_{e,h}(\vec{k}) = \epsilon_{e,h}(\vec{k}) - \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k} - \vec{k}') f_{e,h}(\vec{k}') \quad (3.28)$$

Im nächsten Abschnitt werden einige grundsätzliche Eigenschaften der optischen Konstanten diskutiert, wobei im Vordergrund die homogene BSE steht, die eine Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung für zwei Teilchen unter Berücksichtigung von Vielteilcheneffekten ist.

3.2.1 GRUNDLAGEN

In diesem Abschnitt werden zunächst die einfachsten Eigenschaften der optischen dielektrischen Funktion von direkten Halbleitern diskutiert. Die Diskussion beschränkt sich dabei auf die bekannten Grenzfälle, nämlich auf den exzitonischen bzw. auf den quasimetallischen Grenzfall. Der letzte Punkt wird noch etwas vertieft hinsichtlich der Entwicklung der bisherigen Lösungsversuche der BSE.

Der natürliche Ausgangspunkt zur Berechnung der optischen dielektrischen Funktion im Grenzfall niedriger bzw. hoher Anregungsintensität ist die BSE (3.26). Im Fall niedriger Anregungsintensität ist die Konzentration der Paare so gering, daß jede Wechselwirkung zwischen ihnen vernachlässigt werden kann. Die Fermiverteilungen verschwinden (keine Bandauffüllung) und man erhält aus Gleichung (3.27) für die Polarisationsfunktion in 0-ter Ordnung

$$G_{\vec{q}}^0(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \frac{\delta_{\vec{k}, \vec{k}'}}{\omega + i\delta - E_e(\vec{k}) - E_h(\vec{k}')} \quad (3.29)$$

Entwickelt man $G_{\vec{q}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$ aus (3.26) nach den Lösungen der homogenen BSE, so folgt mit

$$\left[E_n(\vec{q}) - E_g - \frac{p^2}{2m} - \frac{q^2}{2M} \right] \varphi_n(\vec{p}) = - \sum_{\vec{p}'} V(\vec{p} - \vec{p}') \varphi_n(\vec{p}') \quad (3.30)$$

und

$$M = m_e + m_h, \quad a = 1 - b = \frac{m_h}{M} \quad (3.31)$$

die Lösung von (3.20) gemäß

$$G_{\vec{q}}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) = \sum_n \frac{\varphi_n(\vec{k} + a\vec{q}) \varphi_n^*(\vec{k}' + a\vec{q})}{\omega + i\delta - E_n(\vec{q})} \quad (3.32)$$

Setzt man Gleichung (3.32) in Gleichung (3.18) ein, so ergibt sich für die dielektrische Funktion

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - 4\pi e^2 \sum_n |M_n|^2 \frac{2E_n}{(\omega + i\delta)^2 - E_n^2} \quad (3.33)$$

mit dem Interband-Matrixelement

$$M_n = \sum_{\vec{r}} \vec{r}_{vc}(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) \quad (3.34)$$

und den Wellenfunktionen $\psi_n(\vec{r})$. Die Spinsummation ist jetzt in den Zuständen n enthalten. Für den einfachen Fall im sphärischen Zweibandmodell erhält man aus der Schrödinger-Gleichung (3.30) ein Wasserstoff ähnliches Spektrum für das S-Exziton, mit den Eigenwerten

$$E_n(q) = \begin{cases} E_g - \frac{E_x}{n^2} + \frac{q^2}{2M} & , n - \text{diskret} \\ E_g + \frac{k^2}{2m} + \frac{q^2}{2M} & , n = \frac{-i}{a_0 k} \end{cases} \quad (3.35)$$

und den S-artigen Eigenfunktionen

$$|\psi_n(\vec{r}=0)|^2 = \begin{cases} \frac{1}{\pi n^3 a_0^3} & , n - \text{diskret} \\ \frac{\pi \exp(\pi/a_0 k)}{a_0 k \sinh(\pi/a_0 k)} & , n = \frac{-i}{a_0 k} \end{cases} \quad (3.36)$$

Die Exzitonenbindungsenergie E_x ist gegeben durch den Ausdruck

$$E_x = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_0} = \frac{1}{2m a_0^2} \quad (3.37)$$

wobei a_0 der Bohrradius

$$a_0 = \frac{\epsilon_0}{m e^2} \quad (3.38)$$

ist. Für kleine Lichtintensitäten ergibt sich dann im Fall nicht wechselwirkender Elektron-Loch-Paare aus dem Imaginärteil der optischen dielektrischen Funktion (3.33) die sog. Elliot-Formel [52].

$$\text{Im } \epsilon(\omega) \approx \frac{4\pi e^2 |P_{vc}|^2}{m_0 \omega^2} \sum_n |\varphi_n(\vec{r}=0)|^2 \pi \delta(\omega - E_n) . \quad (3.39)$$

Das Energiespektrum besteht daher für Frequenzen an der Bandkante neben einer Folge von diskreten Bindungszuständen, deren Intensität wie $1/n^3$ abnimmt, aus einem Kontinuum von Streuzuständen, ähnlich den Anregungszuständen des Wasserstoffatoms. Die Exzitonenlinien häufen sich gegen $\omega = E_g$ und wegen ihrer endlichen Breite kann man den scharfen Einsatz der Kontinuumsabsorption nicht beobachten.

Abbildung 8 zeigt solch ein typisches Exzitonenpektrum im Bandkantenbereich.

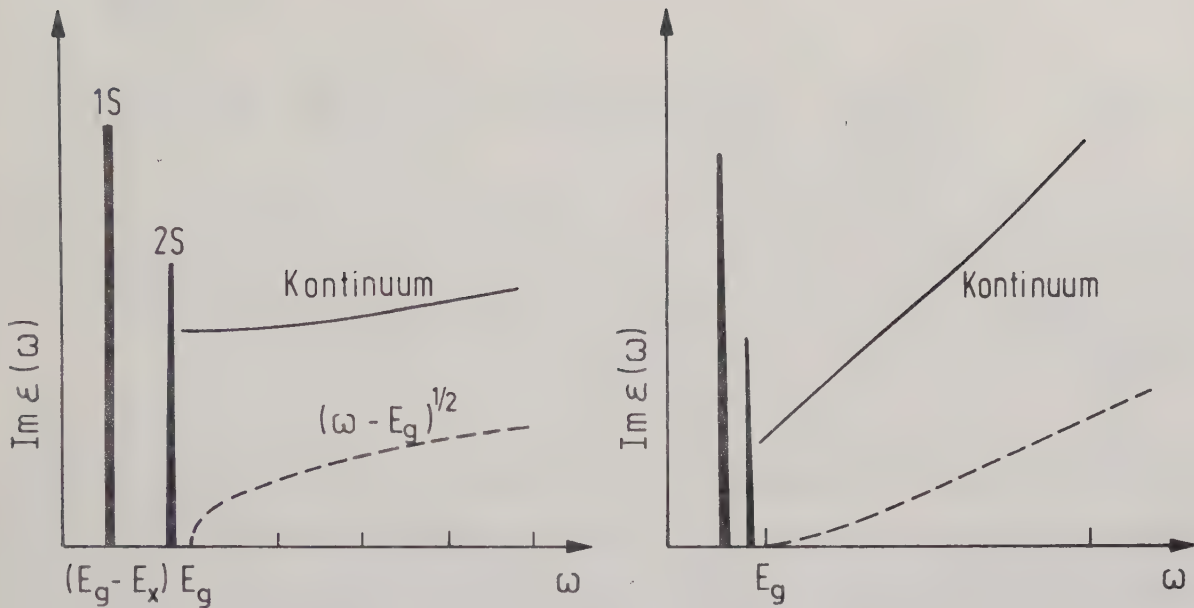


Abbildung 8. Schematische Darstellung der Absorption in der Nähe der Bandkante. : (a) beschreibt die direkt erlaubten und (b) die direkt verbotenen Übergänge. Nur die ersten beiden Linien sind aufgelöst. Freie Teilchenabsorption ist durch die gestrichelte Kurve dargestellt.

Unterhalb E_g gibt es mehr oder weniger scharfe Linien (hier sind zwei aufgelöst), an die sich für $\omega \geq E_g$ ein Kontinuum anschließt. Das Spektrum der höheren diskreten Linien ist zu einem Hintergrund ausgeschmiert und konvergiert in das Ionisationskontinuum. Im Ionisationskontinuum ist die exzitonische Verstärkung (Enhancement) wegen der vorhandenen Elektron-Loch-Korrelation noch erkennbar. Sie führt zu starken Abweichungen von der Linienform unkorrelierter Elektron-Loch-Paare (gestrichelte Linie)

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega) \approx \frac{4\pi e^2 |\rho_{vc}|^2}{m_0^2 \omega^2} \sum_{\vec{k}} \pi \delta(\omega - E_g - \frac{k^2}{2m}) \quad (3.40)$$

bzw.

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega) \approx \frac{2e^2}{m_0^2 \omega^2} |\rho_{vc}|^2 (2m)^{3/2} \sqrt{\omega - E_g} \theta(\omega - E_g).$$

Nachdem das Problem der diskreten Linienform des Exzitons geklärt ist, wird zum Abschluß dieses Kapitels untersucht, inwieweit sich die Zustandsdichte bei hohen Anregungsintensitäten, also im nichtlinearen Regime, ändert.

Bei den bisherigen Betrachtungen wurde davon ausgegangen, daß die Coulomb-Wechselwirkung zwischen dem Elektron und dem Loch durch umgebende Paare nicht beeinflußt wird. Bei hoher Lichtintensität kommt es jedoch, wie in der Einleitung erwähnt, zur Ausbildung eines Elektron-Loch-Plasmas. Der Charakter der Coulomb-Wechselwirkung ändert sich bei Anwesenheit weiterer angeregter Ladungsträger ganz erheblich. Bandfülleffekte sind damit direkt verknüpft, es findet die Inversion des Halbleiters statt.

Um diesen Hochdichte-Grenzfall zu untersuchen, geht man wieder von der BSE aus, betrachtet aber nur den Term in o-ter Ordnung von G_{eh} und vernachlässigt die Korrelation der Elektronen und Löcher (der $V(\vec{k}-\vec{k}')$ enthaltende Term entfällt). Damit folgt für den Imaginärteil der optischen dielektrischen Funktion

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega) \approx 4\pi e^2 (e^{\beta(\omega-\mu)} - 1) \sum_{\vec{k}} |\vec{r}_{vc}|^2 f_h(-\vec{k}) f_e(\vec{k}) \pi \delta(\omega - e_e(\vec{k}) - e_h(-\vec{k})). \quad (3.41)$$

Der Bosefaktor $(\exp(\beta(\omega-\mu))-1)$ in (3.41) macht das Umschaltverhalten für $\omega=\mu$ deutlich. Man erhält optische Verstärkung für $\mu > \omega > E_g$ ($\operatorname{Im} \varepsilon < 0$) und

Absorption für $\omega > \mu = \mu_e + \mu_h$ ($\text{Im } \epsilon > 0$). Die Umschaltstelle ist genau bei dem Punkt, an dem die Frequenz gleich dem quasichemischen Potential μ ist.

Im Rahmen dieser einfachen Theorie können zwar das Auftreten der Exzitonenlinien und des Gains erklärt werden; sie ist jedoch nicht ausreichend, um die im Experiment auftretenden Linienformen zu beschreiben. Um eine quantitative Beschreibung der Linienform für beliebige Dichten zu erhalten, muß man die volle BSE lösen. Dies gilt insbesondere für den mittleren Dichtebereich (Mottdichte), über den die bisher in diesem Abschnitt erhaltenen Formeln keine Aussagen machen. Zunächst erkennt man an der Struktur der BSE, daß auch bei der Mitnahme des V-Terms das an Gleichung (3.41) diskutierte Umschaltverhalten für die vollständige Lösung erhalten bleibt.

In ersten Ansätzen wurde der Imaginärteil der BSE im Hochdichtefall in der statischen Leiternäherung von Tran et al. [2,3] und Zimmermann [53] mit Hilfe einer Faktorisierung der Wechselwirkung behandelt. Abbildung 9 zeigt neben dem $\text{Im } \epsilon(\omega)$ für unkorrelierte Elektron-Loch-Paare die Faktorisierungs- und die exakte Lösung von GaAs. Man sieht eine drastische Änderung der Linienform des Absorptionsspektrums. Das sog. Enhancement, das den Einfluß der Korrelationseffekte erfaßt, ist deutlich oberhalb des quasichemischen Potentials zu erkennen. Diese berechnete Linienform entspricht durchaus der im Experiment auftretenden. Allerdings muß nochmals erwähnt werden, daß die Lösung der BSE für den Imaginärteil in der obengenannten Näherung nur im Hochdichtefall gut ist.

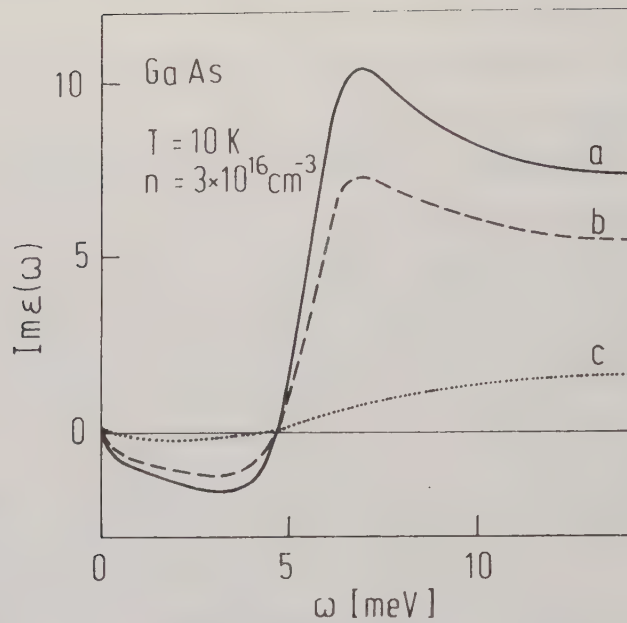


Abbildung 9. : Imaginärteil der dielektrischen Funktion für hochangeregtes GaAs bei $T=10\text{K}$. Einfluß der Korrelation (a-iterierte Lösung, b- faktorisierte Lösung, c- unkorrelierte Elektron-Loch-Paare). (lt. Ref. 51).

3.2.2 QUASISTATISCHE NÄHERUNG

Bekannterweise ist in Systemen mit langreichweitiger Coulomb- Wechselwirkung die Theorie derart zu formulieren, daß anstelle des nackten Coulomb-Potentials $V(\vec{q})$ ein dynamisch abgeschirmtes Coulomb-Potential $V_s(\vec{q}, \omega)$ in allen Gleichungen konsistent eingeführt werden muß [54]. Zur Herleitung der quasistatischen Näherung (QSA) wird von der allgemeinen BSE in abgeschirmter Leiternäherung für die Interband-Polarisationsfunktion ausgegangen [55-57]. Diese Funktion hängt im allgemeinen von einer von außen aufgeprägten und von einer internen Frequenz ab. Es gilt

(3.42)

$$G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', z, \Omega) = G_e(\vec{k}, z) G_h(\vec{k}', \Omega - z) \left[\delta_{\vec{k}\vec{k}'} - \frac{i}{\beta} \sum_{\vec{k}'z'} V_s(\vec{k} - \vec{k}', z - z') G_{eh}(\vec{k}', \vec{k}', z', \Omega) \right]$$

mit den Matsubara-Frequenzen

$$\Omega = \frac{2n\pi}{-i\beta} + \mu_e + \mu_h$$

und

(3.43)

$$z = \frac{2n+1}{-i\beta} + \mu_e .$$

$V_s(\vec{k} - \vec{k}', z - z')$ ist das dynamisch abgeschirmte Coulomb-Potential. Die weitere Behandlung der obigen BSE ergibt sich im Rahmen der sog. Shindo-Näherung, bei der man eine von internen Frequenzen unabhängige Interband-Polarisationsfunktion G_{eh} untersucht [58]. Für das Produkt der Einteilchen-Greenfunktion im ersten Term von (3.42) gilt

(3.44)

$$G_e(\vec{k}, z) G_h(\vec{k}', \Omega - z) = \frac{G_e(\vec{k}, z) - G_h(\vec{k}', \Omega - z)}{\Omega - \epsilon_e(\vec{k}) - \epsilon_h(\vec{k}') - \Delta_{eh}(\vec{k}, z)} ,$$

wobei $\Delta(\vec{k}, z) = \Sigma_e + \Sigma_h$ die Selbstenergien sind, auf deren Struktur später eingegangen wird. Damit folgt für die BSE (3.42)

$$\left[\Omega - \epsilon_e(\vec{k}) - \epsilon_h(\vec{k}) - \Delta_{eh}(\vec{k}, z) \right] G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', z, \Omega) = \left[G_e(\vec{k}, z) + G_h(\vec{k}, \Omega - z) \right] * \\ * \left[\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} - \frac{i}{-\beta} \sum_{\vec{k}''} V_s(\vec{k} - \vec{k}'', z - z') G_{eh}(\vec{k}'', \vec{k}', z', \Omega) \right] \quad (3.45)$$

Mit der Formel

$$\frac{1}{-\beta} \sum_z H(z) = \oint \frac{dz}{2\pi} f_e(z) H(z) \quad (3.46)$$

erhält man die Phasenraum-Besetzungszahl (3.47)

$$F(\vec{k}) = \frac{i}{-\beta} \sum_z \left[G_e(\vec{k}, z) + G_h(\vec{k}, \Omega - z) \right] = 1 - f_e(\epsilon_e(\vec{k})) - f_h(\epsilon_h(\vec{k})),$$

wobei die renormierten Fermiverteilungen aus den Spektralfunktionen bestimmt werden:

$$f_i(\epsilon_i(\vec{k})) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{e^{\beta(\omega - \mu_i)} + 1} A(\vec{k}, \omega) \quad (3.48)$$

μ_i ist bestimmt über

$$n = \sum_{\vec{k}} f_i(\epsilon_i(\vec{k})). \quad (3.49)$$

Die explizite Shindo-Näherung führt nun eine von internen Frequenzen unabhängige Paarfunktion ein, gemäß

$$G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}'', z, \Omega) = \frac{G_e(\vec{k}, z) + G_h(\vec{k}, \Omega - z)}{F(\vec{k})} G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}'', \Omega)$$

bzw.

$$G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}'', \Omega) = \frac{i}{-\beta} \sum_z G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}'', z, \Omega). \quad (3.50)$$

Setzt man (3.50) in (3.45) ein und summiert über z , erhält man die effektive BSE

$$\left[\Omega - e_e(\vec{k}) - e_h(\vec{k}) - \Delta_{eh}(\vec{k}, \Omega) \right] G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \Omega) = F(\vec{k}) * \left[\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} - \sum_{\vec{k}''} I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \Omega) G_{eh}(\vec{k}', \vec{k}'', \Omega) \right], \quad (3.51)$$

wobei I_{eh} die effektive Elektron-Loch-Wechselwirkung

$$I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \Omega) = \left(\frac{i}{-i\beta} \right)^2 \sum_{\vec{z}, \vec{z}'} \frac{G_e(\vec{k}, \vec{z}) + G_h(\vec{k}, \Omega - \vec{z})}{F(\vec{k})} V_S(\vec{k} - \vec{k}', \vec{z} - \vec{z}') * \frac{G_e(\vec{k}', \vec{z}') + G_h(\vec{k}', \Omega - \vec{z}')}{F(\vec{k}')} \quad (3.52)$$

und $\Delta_{e,h}(\vec{k}, \Omega)$ die effektive Bandabsenkung mit (3.53)

$$\Delta_{eh}(\vec{k}, \Omega) = \frac{i}{-i\beta} \sum_{\vec{z}} \frac{\Sigma_e(\vec{k}, \vec{z}) + \Sigma_h(\vec{k}, \Omega - \vec{z})}{F(\vec{k})} \left[G_e(\vec{k}, \vec{z}) + G_h(\vec{k}, \Omega - \vec{z}) \right]$$

ist. Die Selbstenergie für die Elektronen ist dabei

$$\begin{aligned} \Sigma_e(\vec{k}, \vec{z}) &= \frac{i}{-i\beta} \sum_{\vec{k}', \vec{z}'} V_S(\vec{k} - \vec{k}', \vec{z} - \vec{z}') G_e(\vec{k}', \vec{z}') \quad (3.54) \\ &= - \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k} - \vec{k}') \left[f_e(\vec{k}') + \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\text{Im} \epsilon_{||}^{-1}(\vec{k} - \vec{k}', \omega + i\epsilon)}{z - \omega - e_e(\vec{k}')} \left(1 - f_e(\vec{k}') - g(\omega) \right) \right], \end{aligned}$$

wobei $\epsilon_{||}$ die longitudinale dielektrische Funktion ist. Vergleicht man (3.52) mit (3.53) und berücksichtigt (3.54), so erhält man folgende Rela-

tion, bei der sich die Gleichbehandlung von Selbstenergie und Vertexkorrekturen widerspiegelt ($\Omega \rightarrow \omega + i\delta$)

$$\Delta_{eh}(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{k}'} (I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) F(\vec{k}') - V(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{ss'}) . \quad (3.55)$$

Wählt man z.B. für

$$I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) \longrightarrow V(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{ss'} \quad (3.56)$$

$$\Delta_{eh}(\vec{k}, \omega) \longrightarrow - \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k} - \vec{k}') [f_e(\vec{k}') + f_h(\vec{k}')] \delta_{ss'} ,$$

so folgt sofort die BSE (3.26) in HF-Näherung. Einen Ausdruck für die QSA ohne dynamische Korrekturen erhält man durch folgende Relation

$$I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) \longrightarrow V_s(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{ss'} \quad (3.57)$$

$$\Delta_{eh}(\vec{k}, \omega) \longrightarrow \sum_{\vec{k}'} [V_s(\vec{k} - \vec{k}') - V(\vec{k} - \vec{k}')] \delta_{ss'} - \sum_{\vec{k}'} V_s(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{ss'} [f_e(\vec{k}') + f_h(\vec{k}')] ,$$

wobei

$$V_s(\vec{q}) = \frac{V(\vec{q}) \epsilon_0}{\epsilon_{||}(\vec{q})} \quad (3.58)$$

ist. Die Einteilchenenergien setzen sich aus einem Coulomb- und einem Austauschterm zusammen. Der mobile Charakter der Ladungsträger wird hier vernachlässigt. Der letzte Term auf der rechten Seite entspricht dem Energiegewinn eines lokalisierten Elektrons/Lochs im Elektron-Loch-Plasma.

Um dynamische Effekte zu berücksichtigen, wird nun die effektive Wechselwirkung nicht über die statische Abschirmfunktion $\epsilon_{||}^{-1}(\vec{q})$ bestimmt, sondern über die dynamische Abschirmfunktion $\epsilon_{||}^{-1}(\vec{q}, \omega)$, genommen bei den Frequenzen $q^2/2m_e$ bzw. $q^2/2m_h$. Dabei wird jedoch nur derjenige Anteil von $\epsilon_{||}^{-1}(\vec{q}, \omega)$ berücksichtigt, der für die Emission von Paaranregungen bzw. kollektiven Anregungen verantwortlich ist, also

$$V_{ij}^{eff}(\vec{q}) = V(\vec{q}) \left[1 + \epsilon_0 \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\pi} \left(\frac{1}{\frac{q^2}{2m_i} + \omega'} + \frac{1}{\frac{q^2}{2m_j} + \omega'} \right) \text{Im} \epsilon_{||}^{-1}(\vec{q}, \omega') \right]. \quad (3.59)$$

Die thermische Besetzung von Plasmonen wird hier z.B. vernachlässigt.

Im Rahmen der Plasmonpol-Näherung läßt sich (3.59) aus folgender Formel für die mittlere Energie herleiten:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i\vec{k}\vec{q}} M_q^2 \left[\frac{f_i(\vec{k})[1-f_i(\vec{k}+\vec{q})] N_q}{\epsilon_{i\vec{k}} - \epsilon_{i\vec{k}+\vec{q}} + \omega_q} + \frac{f_i(\vec{k})[1-f_i(\vec{k}+\vec{q})][1+N_q]}{\epsilon_{i\vec{k}} - \epsilon_{i\vec{k}+\vec{q}} - \omega_q} \right] - \frac{1}{2} \sum_{i\vec{k}\vec{q}} f_i(\vec{k}) V(\vec{q}) f_i(\vec{k}+\vec{q}). \quad (3.60)$$

Der erste Term in (3.60) beschreibt die Austauschenergie, der zweite die Absorption von Plasmonen und der dritte die Emission von Plasmonen. Setzt man die Zahl der Plasmonen N_q gleich Null und ferner $\epsilon_{i\vec{k}} - \epsilon_{i\vec{k}+\vec{q}} \approx -\epsilon_{i\vec{q}}$, ergibt sich

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i\vec{k}\vec{q}} f_i(\vec{k}) \left[V(\vec{q}) - \frac{2M_q^2}{\epsilon_{i\vec{q}} + \omega_q} \right] f_i(\vec{k}+\vec{q}) - \sum_{i\vec{k}\vec{q}} M_q^2 \frac{f_i(\vec{k})}{\epsilon_{i\vec{q}} + \omega_q}. \quad (3.61)$$

Für die effektive Wechselwirkung erhält man damit

$$V_{ij}^{eff}(\vec{k}-\vec{k}') = \frac{1}{2} \left[\frac{\delta^2 E}{\delta f_i(\vec{k}) \delta f_i(\vec{k}')} + \frac{\delta^2 E}{\delta f_j(\vec{k}) \delta f_j(\vec{k}')} \right] \quad (3.62)$$

bzw.

$$= V(\vec{k}-\vec{k}') - \frac{M_{\vec{k}-\vec{k}'}^2}{\epsilon_i \vec{k}-\vec{k}' + \omega_{\vec{k}-\vec{k}'}} - \frac{M_{\vec{k}-\vec{k}'}^2}{\epsilon_j \vec{k}-\vec{k}' + \omega_{\vec{k}-\vec{k}'}} ,$$

was (3.59) entspricht.

Das effektive Wechselwirkungspotential V_{ij}^{eff} hat die gleiche Struktur wie das Haken-Potential, das die Abschirmung durch LO-Phononen beschreibt [59,60].

In der Plasmonpol-Näherung gilt (3.63)

$$\text{Im } \epsilon_{ii}^{-1}(\vec{q}, \omega) = - \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\omega_{pi}^2}{2\omega_q} \delta(\omega - \omega_q) , \quad \omega > 0$$

und damit

$$M_q^2 = \frac{1}{2} V(q) \frac{\omega_{pi}^2}{\omega_q} \quad (3.64)$$

und

$$V_{ij}^{eff}(\vec{k}-\vec{k}') = V(\vec{k}-\vec{k}') \left[1 - \frac{\omega_{pi}^2}{\omega_q^2} F_{ij}(\vec{k}-\vec{k}') \right] \quad (3.65)$$

mit dem dynamischen Korrekturterm (3.66)

$$F_{ij}(\vec{k}-\vec{k}') = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1 + \frac{(\vec{k}-\vec{k}')^2}{2m_i \omega_q}} + \frac{1}{1 + \frac{(\vec{k}-\vec{k}')^2}{2m_j \omega_q}} \right) .$$

ω_{PL} und ω_q sind hierbei die Plasmafrequenz und der sog. Single-Plasmon Pol (SPP), der die Gesamtheit der RPA-Anregungen repräsentieren soll [61]:

$$\frac{\omega_{pi}^2}{\omega_q^2} = 1 - \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{ii}(q)} \quad (3.67)$$

mit

$$\omega_q^2 = \omega_{pi}^2 \left(1 + \frac{q^2}{q_0^2} \right) + D q^4 \quad (3.68)$$

und

$$\omega_{pl}^2 = \frac{4\pi e^2 n}{\epsilon_0 m} \quad (3.69)$$

$\epsilon_{||}$ ist die statische longitudinale dielektrische Funktion des Elektron-Loch-Plasmas in der SPP-Approximation. n ist die Dichte der freien Ladungsträger und ϵ_0 die statische dielektrische Konstante. q_0 repräsentiert die Abschirmwellenzahl mit

$$q_0 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty} \sum_i \frac{\partial n}{\partial \mu_i^0} \quad (3.70)$$

wobei μ_i^0 das quasichemische Potential freier Elektronen bzw. Löcher ist. Für große Temperaturen geht q_0 in die Debye-Hückel-Wellenzahl

$$q_{DH}^2 = \frac{8\pi n e^2}{\epsilon_0 k_B T} \quad (3.71)$$

und für kleine Temperaturen in die Thomas-Fermi-Wellenzahl

$$q_{TF}^2 = \frac{12\pi n e^2}{\epsilon_0 k_F^2} (m_e + m_h) \quad (3.72)$$

über. k_F ist die Fermi-Wellenzahl

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (3.73)$$

Abhängig von der Zahl der Leitungsbänder ist die Entartung v zu berücksichtigen. Damit gilt für $k_F = (3\pi^2 n/v)^{1/3}$, wobei nun entsprechend die Abschirmwellenzahl zu modifizieren ist.

Der Koeffizient D in den q^4 -Term aus Gleichung (3.68) ist ein Anpassparameter, der so gewählt wird, daß die Grundzustands-Energie mit den RPA-Ergebnissen gut übereinstimmt. Als mittleren Dispersionswert erhält man

$$D = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{1}{2m_n} \right)^2 = \frac{1}{16m^2} \quad (3.74)$$

Eine Dämpfung der Plasmamode kann nachträglich in das SPP-Modell eingebaut werden, um z.B. die Intervallenzband-Übergänge zu berücksichtigen. Damit hat man einen zusätzlichen Parameter, der geeignet zu wählen ist.

Das effektive Wechselwirkungspotential V_{ij}^{eff} (3.59) wurde in vereinfachter Form von Mahler zur Beschreibung des Elektron-Loch-Plasmas benutzt [19]. Läßt man die Masse der Teilchen oder ω_{pL} gegen unendlich gehen ($2m_i \omega_{pL} \rightarrow \infty$), erhält man wieder

$$\lim_{m_n, m_e \rightarrow \infty} V_{ij}^{eff}(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon_{11}(\vec{q})} \quad (3.75)$$

Die bisherigen Aussagen zur Abschirmung der Elektron-Loch-Paare beziehen sich fast ausschließlich auf den langwelligen bzw. Hochdichte-Grenzfall, wobei auf die Problematik der gebundenen Zustände und deren Abschirmung noch nicht eingegangen worden ist. Dies wird auch nicht geschehen, indem nur ein Exziton in einem Gas freier Elektronen und Löcher betrachtet wird. In den obengenannten Grenzfällen sind das SPP- bzw. das RPA-Modell exakt. Im niederen und im mittleren Dichtebereich bei tiefen Temperaturen liefern beide Modelle unzureichende Ergebnisse. Um dennoch zu dem herausfordernden Problem des "Mottübergangs" einige Aussagen zu treffen, muß man sich auf die Fälle hoher Dichte oder Temperatur beschränken.

Hinsichtlich der Wellenzahlabhängigkeit der Abschirmung läßt sich noch eine Verbesserung anbringen, indem im kurzwelligen Bereich parallele und

antiparallele Spinkorrelationen berücksichtigt werden. Diese werden durch eine sog. Lokalfeldkorrektur ausgedrückt.

Im folgenden wird die Lokalfeldkorrektur über die Intraband-Polarisationsfunktion berechnet und die sich daraus ergebenden Modifizierungen der longitudinalen dielektrischen Funktion werden diskutiert. Eine Beschreibung des Einflusses der Lokalfeldkorrektur auf die optischen Spektren am Beispiel von GaAs schließt sich in Kap. 6 an.

4. LOKALFELDKORREKTUREN

In diesem Kapitel werden im Rahmen der Theorie des homogenen Elektronengases explizite Berechnungen der Lokalfeldkorrektur in statisch abgeschirmter Hartree-Fock-Näherung vorgestellt. Dabei wird die BSE für die Intraband-Polarisationsfunktion numerisch gelöst. Das bemerkenswerteste Ergebnis ist, daß die Behauptung einiger Autoren nicht zutrifft, wonach die Variationslösung der BSE für alle Dichten und alle $\vec{q}$ -Werte gelte [62].

4.1 LONGITUDINALE DIELEKTRISCHE FUNKTION DES HOMOGENEN ELEKTRONENGASES

Die statische dielektrische Funktion des homogenen Elektronengases ergibt sich bekanntlich zu [42,48,63]:

$$\epsilon_{11}(\vec{q}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} P(\vec{q}) \quad , \quad (4.1)$$

wobei $P(\vec{q})$ die longitudinale statische Polarisationsfunktion ist. Üblicherweise schreibt man (4.1) in der Form der Clausius-Mosotti-Formel

$$\epsilon_{11}(\vec{q}) = 1 - \frac{\frac{4\pi e^2}{q^2} P_0(\vec{q})}{1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} G_{xc}(\vec{q}) P_0(\vec{q})} \quad . \quad (4.2)$$

Die Funktion $G_{xc}(\vec{q})$ wird als Lokalfeldkorrektur bezeichnet, wobei der Index xc für Austausch- und Korrelationseffekte steht [64]. Setzt man in Gleichung (4.2) $G_{xc}(\vec{q})=0$, so folgt das RPA-Ergebnis

$$\epsilon_{11}(\vec{q}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} P_0(\vec{q}) . \quad (4.3)$$

Die RPA vernachlässigt also jegliche Lokalfeldkorrekturen. $P_0(\vec{q})$ ist die Lindhard-Formel mit [65]

$$P_0(\vec{q}) = 2 \sum_{\vec{k}} P_0(\vec{k}, \vec{q}) = 2 \sum_{\vec{k}} \frac{f(\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2}) - f(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})}{E(\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2}) - E(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})} \quad (4.4)$$

bzw.

$$= - \frac{m K_F}{2\pi^2} \left[1 + \frac{k_F}{q} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| \right] ,$$

wobei

$$E(k) = \frac{k^2}{2m} , \quad a_0 = \frac{1}{me^2} , \quad E_0 = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{1}{2ma_0^2}$$

und $f(k) = \theta(k_F - k)$ die Fermiverteilung der Elektronen für $T=0$ ist.

Bevor man zur Berechnung von $G_{xc}(\vec{q})$ übergeht, werden zunächst einige wichtige Grenzfälle der longitudinalen dielektrischen Funktion und der Lokalfeldkorrektur diskutiert. Im Grenzfall kleiner Temperaturen hängt das betrachtete Elektronen-System nur von seiner Dichte n ab. Diese wird ausgedrückt durch den dimensionslosen Parameter r_s gemäß

$$n = \left(\frac{4\pi}{3} r_s a_0^3 \right)^{-1} . \quad (4.5)$$

n ist hierbei die Dichte der Elektronen. Im Grenzfall hoher Dichten ist $r_s \ll 1$; dies ist der Gültigkeitsbereich der RPA, wobei kleiner Impulsaustausch $\vec{q}$ angenommen wird. In dem schwierig zu behandelnden mittleren Dichtebereich liegen die r_s -Werte für Metalle zwischen $2 < r_s < 6$. Für derartig große r_s -Werte hat sich gezeigt, daß die Verwendung der RPA-Näherungen bei der Berechnung verschiedener physikalischer Größen (Kompressibilität,

Paar-Korrelationsfunktion) unzureichend ist. Im Fall der hochangeregten Halbleiter sind die auftretenden r_s -Werte im Mittel kleiner, aber auch hier sind Hochdichteentwicklungen zur Beschreibung der Abschirmeffekte unbrauchbar [48].

Für den hier betrachteten Fall der Abschirmung durch freie Elektronen ist das Verhalten von $\epsilon_{11}(\vec{q})$ im langwelligen Grenzfall gegeben durch die exakte Relation

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \epsilon_{11}(\vec{q}) = 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \frac{K}{K_0} \quad , \quad (4.6)$$

wobei q_{TF} (siehe (3.72)) die Thomas-Fermi-Abschirmwellenzahl und K_0 die isotherme Kompressibilität eines nicht wechselwirkenden Systems mit

$$K_0 = \frac{1}{n^2} \frac{\partial n}{\partial \mu_0} \quad (4.7)$$

ist. μ_0 ist das chemische Potential der freien Elektronen. In der RPA-Näherung ist $K/K_0=1$. Die Kompressibilität K des wechselwirkenden Systems kann mit Hilfe der zweiten Ableitung der totalen Energie nach der Dichte berechnet werden. Die Forderung, daß der Wert von K , den man über die Energie erhält, mit dem aus (4.6) übereinstimmt, ist als die sog. Kompressibilitäts-Summenregel bekannt. Mit der Kompressibilitäts-Summenregel hat man eine einfache Formel in der Hand, um den Gültigkeitsbereich der Näherungen in der dielektrischen Funktion einem kritischen Test zu unterziehen [66-68].

Für den langwelligen Grenzfall der statischen Lokalfeldkorrektur gilt [69]:

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow \infty} G_{xc}(\vec{q}) = \frac{2}{3} (1 - g(0)) \quad , \quad (4.8)$$

wobei $g(0)$ die Paar-Korrelationsfunktion im Ursprung ist. Bei alleiniger Berücksichtigung von Austauscheffekten ergibt sich aus (4.6)

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \epsilon_{||}(\vec{q}) = \frac{4me^2}{\pi k_F} \left(\frac{k_F}{q} \right)^2 \frac{1}{1 - \frac{r_s}{\pi} \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3}} \quad (4.9)$$

bzw.

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} G_x(\vec{q}) = \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k_F} \right)^2. \quad (4.10)$$

Andrerseits erhält man im kurzwelligen Grenzfall

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow \infty} G_x(\vec{q}) = \frac{1}{3}. \quad (4.11)$$

Der Grenzwert (4.11) impliziert, daß $g(0)=1/2$ ist. Bei Berücksichtigung der Austauschwechselwirkung beträgt also $g(0)$ nur noch $1/2$, da sich Elektronen mit parallelem Spin aus dem Wege gehen. Nimmt man noch die Coulombabstoßung der Elektronen mit antiparallelem Spin hinzu (und zwar exakt), muß $0 \leq g(0) \leq 1/2$ sein. Entsprechende Theorien existieren bis heute jedoch kaum, $g(0)$ wird in den meisten Theorien sogar negativ [70-72].

Im Gegensatz zu früheren Arbeiten wird hier die statische Lokalfeldkorrektur direkt bestimmt durch Lösung der BSE für die frequenzunabhängige Intraband - Polarisationsfunktion. Im statischen Grenzfall folgt mit (4.1) und (4.2)

$$G_{xc}(\vec{q}) = \frac{q^2}{4\pi e^2} \left(\frac{1}{P(\vec{q})} - \frac{1}{P_0(\vec{q})} \right). \quad (4.12)$$

Die Berechnung von $P(\vec{q})$ und damit die Bestimmung von $G_{xc}(\vec{q})$ erfolgt im nächsten Abschnitt.

4.2 LÖSUNG DER BETHE-SALPETER-GLEICHUNG FÜR DIE INTRABAND-POLARISATIONSFUNKTION IN STATISCH ABGESCHIRMTER HARTREE-FOCK-NÄHERUNG

Die statische longitudinale dielektrische Funktion ist bestimmt durch die Intradband-Polarisationsfunktion $P(\vec{q})$ (siehe (4.1)), wobei

$$P(\vec{q}) = 2 \sum_{\vec{k}} P(\vec{k}, \vec{q}) \quad (4.13)$$

ist. Die 2 steht für den Spin. Innerhalb der Hartree-Fock-Näherung gehorcht die Funktion $P(\vec{k}, \vec{q})$ der BSE (4.14)

$$P(\vec{k}, \vec{q}) = P_{\text{HF}}(\vec{k}, \vec{q}) \left[1 - \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k} - \vec{k}') P(\vec{k}', \vec{q}) \right],$$

wobei

$$P_{\text{HF}}(\vec{k}, \vec{q}) = \frac{f(\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2}) - f(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})}{E_{\text{HF}}(\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2}) - E_{\text{HF}}(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})} \quad (4.15)$$

die renormierten Einteilchenenergien

$$E_{\text{HF}}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k} - \vec{k}') \quad (4.16)$$

beinhaltet. Offenbar läßt sich anstelle von Gleichung (4.14) für $P(\vec{k}, \vec{q})$ auch folgende Gleichung für die Vertexfunktion $\Lambda(\vec{k}, \vec{q})$, definiert durch

$$P(\vec{k}, \vec{q}) = P_0(\vec{k}, \vec{q}) \Lambda(\vec{k}, \vec{q}) \quad (4.17)$$

lösen:

$$(4.18)$$

$$\Lambda(\vec{k}, \vec{q}) = 1 - \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k} - \vec{k}') \left[f(\vec{k}' - \frac{\vec{q}}{2}) - f(\vec{k}' + \frac{\vec{q}}{2}) \right] \left[\frac{\Lambda(\vec{k}', \vec{q})}{\vec{k}' \vec{q} / m} - \frac{\Lambda(\vec{k}, \vec{q})}{\vec{k} \vec{q} / m} \right].$$

Unter Berücksichtigung der Rotationssymmetrie um die Richtung von $\vec{q}$ folgt eine zwei-dimensionale Integralgleichung für $\Lambda(\vec{k}, \vec{q})$. Sie wird mit Hilfe einer Gauß-Quadratur in sphärischen Koordinaten in ein lineares Gleichungssystem überführt, das mit einer Matrixinversion gelöst wird. Zur Lösung dieses Gleichungssystems genügen in der Regel 300-420 Punkte [73].

Unter der Annahme einer k -unabhängigen Vertexfunktion ergibt sich aus (4.18) die sog. Variationslösung der BSE:

$$G_V(\vec{q}) = - \frac{P_1(\vec{q})}{V(\vec{q}) P_0^2(\vec{q})} \quad , \quad (4.19)$$

wobei $P_1(\vec{q})$ der Term erster Ordnung der Entwicklung von $P(\vec{q})$ nach Potenzen von e^2 ist. Wie man offensichtlich aus Gleichung (4.19) erkennt, ist $G_V(\vec{q})$ ladungsunabhängig. Deshalb kann $G_V(\vec{q})$ nicht exakt für alle r_s - und $\vec{q}$ -Werte sein. $G_V(\vec{q})$ ist exakt im Grenzfall $\vec{q} \rightarrow \infty$

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow \infty} G_V(\vec{q}) = \lim_{\vec{q} \rightarrow \infty} G_x(\vec{q}) = \frac{1}{3} \quad , \quad (4.20)$$

da dieses Regime von dem ersten Ordnungsterm dominiert wird. $G_V(\vec{q})$ ist auch exakt für $\vec{q} \rightarrow 0$

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} G_V(\vec{q}) = \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} G_x(\vec{q}) = \frac{q^2}{4\kappa_F^2} \quad . \quad (4.21)$$

In diesem Grenzfall kann die Vertexgleichung exakt gelöst werden und führt zur Gleichung (4.19).

Zur Bestimmung der Intraband-Polarisationsfunktion in statisch abgeschirmter HF-Näherung wird im folgenden in Gleichung (4.18) das nackte Coulomb-Potential durch ein abgeschirmtes ersetzt, gemäß

$$V_S(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa^2} \quad (4.22)$$

Der Abschirmwellenvektor wird entweder als Bruchteil von q_{TF} , k_F oder selbstkonsistent ($\kappa = k_{sc}$) im Grenzfall kleiner $\vec{q}$ -Werte über die Kompressibilitäts-Summenregel bestimmt:

$$\kappa^2 = \frac{q_{TF}^2}{1 - \frac{q_{TF}^2}{4k_F^2} \left[1 - \frac{\kappa^2}{4k_F^2} \ln \left(1 + \frac{4k_F^2}{\kappa^2} \right) \right]} \quad (4.23)$$

Für die exakten Grenzwerte der Lösung von $G_{xc}(\vec{q})$ erhält man nun

$$\begin{aligned} \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} G_{xc}(\vec{q}) &= \frac{q^2}{4k_F^2} \left[1 - \frac{\kappa^2}{4k_F^2} \ln \left(1 + \frac{4k_F^2}{\kappa^2} \right) \right] \\ &= \frac{q^2}{q_{TF}^2} \left(1 - \frac{k_0}{\kappa} \right) \end{aligned} \quad (4.24)$$

und

$$\begin{aligned} \lim_{\vec{q} \rightarrow \infty} G_{xc}(\vec{q}) &= \frac{1}{3} + \frac{3}{8} \frac{\kappa^2}{k_F^2} - \frac{1}{2} \frac{\kappa^2}{k_F^2} \left[\frac{1}{8} \frac{\kappa^2}{k_F^2} + \frac{\kappa}{k_F} \operatorname{arctg} \frac{2k_F}{\kappa} \right. \\ &\quad \left. - \frac{3}{8} \frac{\kappa^2}{k_F^2} \left(1 + \frac{1}{12} \frac{\kappa^2}{k_F^2} \right) \ln \left(1 + \frac{4k_F^2}{\kappa^2} \right) \right] \\ &= \frac{2}{3} (1 - g(0)) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Für mittlere Wellenzahlen $\vec{q}$ ist das Verhalten von $G_{xc}(\vec{q})$ nicht genau bekannt. Während einige approximative Rechnungen [74-76] auf eine logarithmische Singularität bei $q < 2k_F$ hinweisen, erhalten andere Autoren

[70] ein stetig monotones Anwachsen von $G_{xc}(\vec{q})$ bis zu einem endlichen Wert bei $\vec{q} \rightarrow \infty$. Abbildung 10 zeigt einige Kurven für $G_{xc}(\vec{q})$ mit $\kappa = k_{TF}$ und $\kappa = k_{sc}$ für verschiedene r_s -Werte. Im Hochdichte- Grenzfall $r_s \rightarrow 0$ zeigt $G_{xc}(\vec{q})$ einen sehr scharfen Peak in der Nähe von $q \leq 2k_F$. Mit fallender Dichte bzw. wachsender Abschirmung wird die Struktur deutlich schwächer. Wie man deutlich erkennt, überlebt der Peak von $G_{xc}(\vec{q})$ auch mit selbstkonsistenter Abschirmung. Die Variationslösung $G_V(\vec{q})$ aus Gleichung (4.19) mit $V(\vec{q}) = V_s(\vec{q})$ stimmt innerhalb der Zeichengenauigkeit mit den exakten Daten von $G_{xc}(\vec{q})$ überein. Man sieht, daß zur Diskussion der abgeschirmten Lokalfeldkorrektur diese Näherung brauchbar ist und man von der Beziehung (4.19) ausgehen kann.

Mit kleiner werdender Abschirmung treten die erwähnten Unterschiede hervor, wie in Abbildung 11 zu sehen ist (hier ist anstelle $G_{xc}(\vec{q})$ das Verhältnis von paramagnetischer Suszeptibilität und Pauli-Suszeptibilität, welches proportional zu $-P(\vec{q})$ ist, aufgetragen). Während die exakte Lösung in der Nähe von $q = 2k_F$ Pole hat, zeigt demgegenüber die Variationslösung in diesem Regime nur einen kleinen Peak. Es ist mit der Variationslösung nicht möglich die hier zu Tage tretenden Spin-Dichte-Wellen Instabilität des Elektronengases zu reproduzieren [77-79].

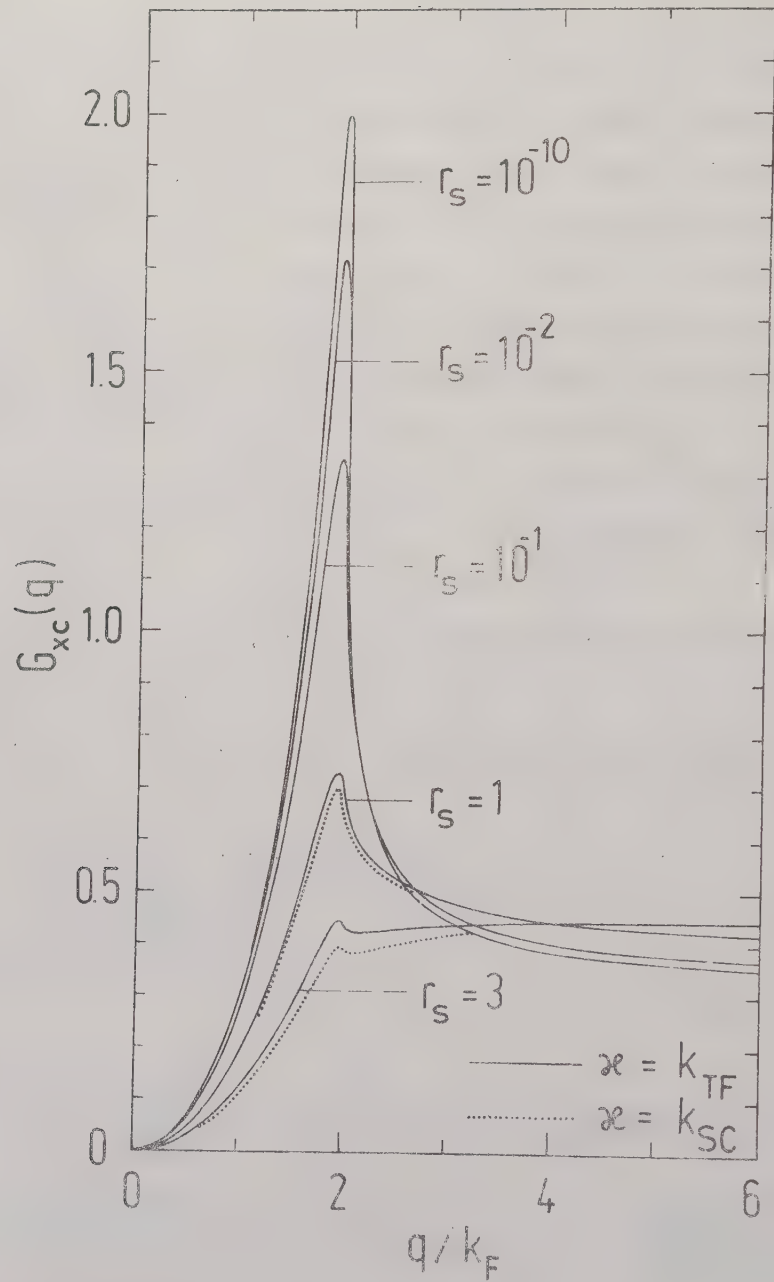


Abbildung 10. : Berechnete Lokalfeldkorrektur $G_{xc}(\vec{q})$ aus Gleichung (4.12) mit Thomas - Fermi- und Selbstkonsistenter-Abschirmung für verschiedene r_s -Werte.

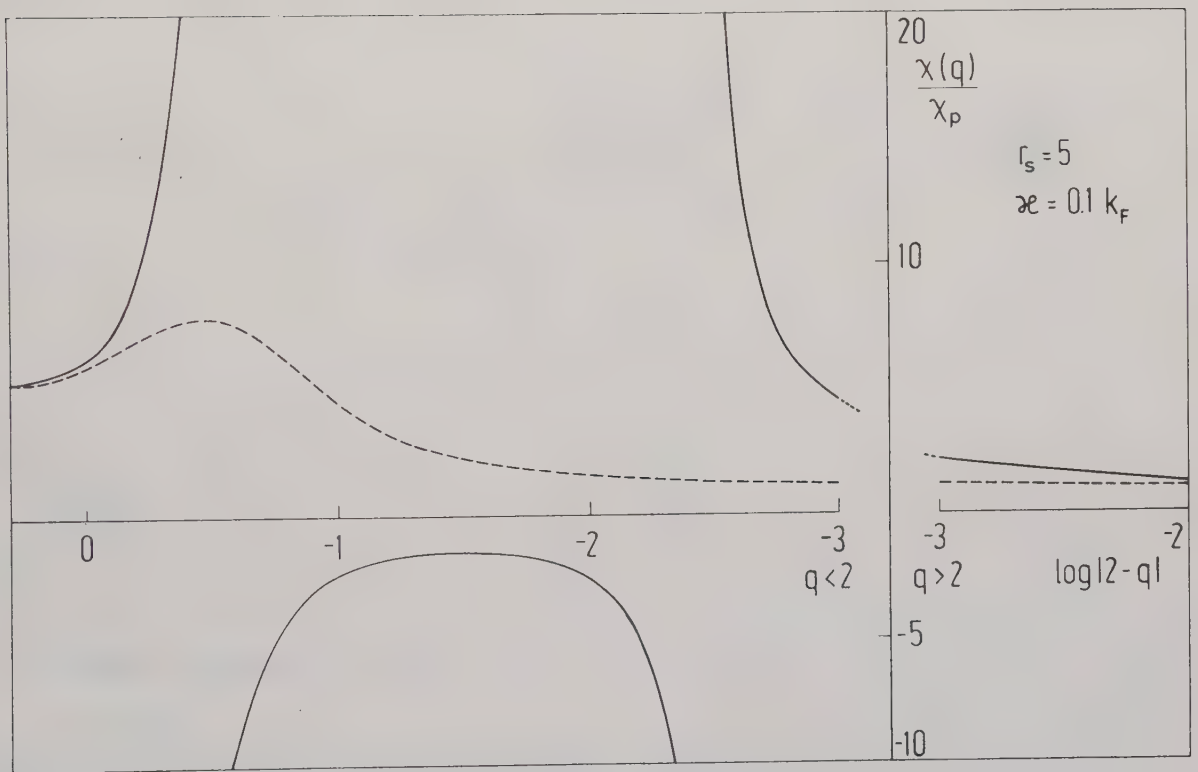
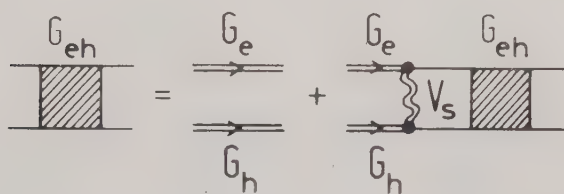


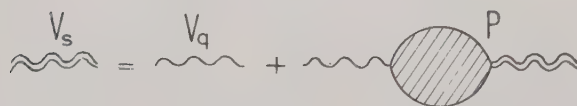
Abbildung 11. : Berechnete Suszeptibilität für $r_s = 5$ und $\kappa = 0.1 k_F$.

5. LÖSUNG DER BETHE-SALPETER-GLEICHUNG FÜR DIE INTERBAND-POLARISATIONSFUNKTION

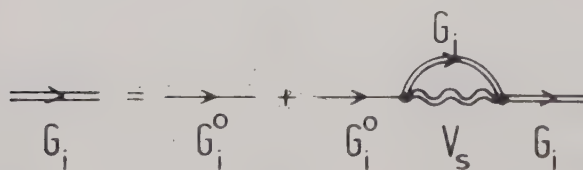
Mit Hilfe der in den beiden vorangegangenen Kapiteln gewonnenen Ergebnisse soll nun die Interband - Polarisationsfunktion berechnet werden. Die nachstehenden Diagramme verdeutlichen noch einmal das grundlegende Approximationsschema.



$$G_{eh} = G_e G_h + G_e V_s G_{eh} \quad (5.1)$$



$$V_s = V_q + V_q P V_s \quad (5.2)$$



$$G_i = G_i^0 + G_i^0 V_s G_i \quad (5.3)$$

Gemäß Gleichung (3.18) ist schließlich die optische dielektrische Funktion gegeben durch [80]

$$(5.4)$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - 4\pi e^2 \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} r_{vc}(\vec{k}) r_{vc}^*(\vec{k}') G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) .$$

Für die Abschirmfunktion ergibt sich aus (3.65)

$$\epsilon_{ij}(\vec{q}) = \frac{1}{\epsilon_0} \left(1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_q^2} F_{ij}(\vec{q}) \right) . \quad (5.5)$$

Da in die SPP-Approximation sowieso nur die Grenzwerte $\vec{q} \rightarrow 0$ und $\vec{q} \rightarrow \infty$ eingehen, lassen sich die Einflüsse von dynamischen Effekten und lokalem Austausch- und Korrelationspotential in einer effektiven SPP Dispersion ω_{qij} zusammenfassen.

Zur Lösung von (5.1) ist es vorteilhaft, statt $G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)$ die kontrahierte Funktion

$$Q(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{k}'} M(\vec{k}') G_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) \quad (5.6)$$

zu betrachten, wobei sich das Matrixelement $M(\vec{k})$ aus dem Dipolmatrixelement mit

$$|\Gamma_{vc}(\vec{k})| = M(\vec{k}) \left(\frac{m_0^2}{4mE_g} \right)^{1/2} \quad (5.7)$$

zu

$$M(\vec{k}) = \frac{E_g}{E_g + k^2/2m} \quad (5.8)$$

ergibt. Die k -Abhängigkeit des Matrixelements kann nicht vernachlässigt werden, da die Bestimmung von $\text{Re}(\omega)$ eine k -Integration bis ins Unendliche erfordert.

Die kontrahierte Funktion (5.6) in (5.1) eingesetzt liefert folgende BSE für $Q(\vec{k}, \omega)$:

$$Q(\vec{k}, \omega) = Q_0(\vec{k}, \omega) \left[1 - \sum_{\vec{k}'} I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}', \omega) Q(\vec{k}', \omega) / M(\vec{k}') \right] \quad (5.9)$$

mit

$$Q_0(\vec{k}, \omega) = \frac{F(\vec{k}) M(\vec{k})}{\omega + i\delta - e_e(\vec{k}) - e_h(\vec{k})} \quad (5.10)$$

wobei $e_i(\vec{k})$ die renormierten Einteilchenenergien sind. Da zur Absorption nur S-artige Zustände beitragen, kann man sich bei der Behandlung von (5.9) auf die S-Wellenstreuung beschränken und das effektive Wechselwirkungspotential I_{eh} durch seinen winkelmittelten Wert [81]

$$I_{eh}(k, k', \omega) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dz I_{eh}(k^2 + k'^2 - 2kk'z)^{1/2} \quad (5.11)$$

ersetzen. Im Grenzfall verschwindender Dichte hat das effektive Wechselwirkungspotential (5.11) eine logarithmische Singularität bei $k=k'$

$$I_{eh}(k, k') = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_0 k'k} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \quad (5.12)$$

Um die Singularität des Integralkerns zu beheben, addiert und subtrahiert man auf der rechten Seite von (5.9) den folgenden Term

$$\sum_{\vec{k}'} \frac{2k^4 I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}') Q(\vec{k}', \omega)}{M(\vec{k}) k'^2 (k^2 + k'^2)} \quad (5.13)$$

Dieser Term ist so beschaffen, daß er einfach zu berechnen ist [82,83].

Damit läßt sich der zweite Term in (5.9) folgendermaßen umschreiben:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}'} \frac{I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}')}{M(\vec{k})} Q(\vec{k}', \omega) &= \frac{Q(\vec{k}, \omega)}{M(\vec{k})} \sum_{\vec{k}'} I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}') \frac{2k^4}{k'^2 (k^2 + k'^2)} \\ &+ \sum_{\vec{k}'} \frac{I_{eh}(\vec{k}, \vec{k}')}{M(\vec{k})} \left[Q(\vec{k}', \omega) - \frac{2k^4}{k'^2 (k^2 + k'^2)} Q(\vec{k}, \omega) \right] \end{aligned} \quad (5.14)$$

Man erkennt sofort, daß für $k \rightarrow k'$ der Klammerausdruck verschwindet und damit das Problem der Singularität behoben ist.

Um schließlich Lebensdauereffekte zu berücksichtigen, wird auf Grund des fehlenden Imaginärteils in der quasistatischen Näherung eine phänomenologische Dämpfungskonstante eingeführt, die zumindest qualitativ z.B. Phononen-Streuprozesse beschreiben soll. Sie wird so gewählt, das die Zahl der aufgelösten Exzitonlinien mit dem experimentellen Befund übereinstimmt. Damit geht (5.10) in

$$Q_0(\vec{k}, \omega) = M(\vec{k}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{1 - f_e(e_e(\vec{k})) - f_h(e_h(\vec{k}))}{\omega - \omega' + i\delta} \frac{\delta}{(\omega' - e_e(\vec{k}) - e_h(\vec{k}))^2 + \delta^2} \quad (5.15)$$

über. Das Integral über $(1-f_e)$ kann analytisch bestimmt werden, während das verbleibende Hauptwertintegral numerisch ausgewertet werden muß.

Zur numerischen Lösung der Integralgleichung (5.9) wird die k -Integration vom Intervall $[0, \infty]$ auf ein endliches Intervall transformiert [84]. Nach der Transformation wird die Integralgleichung diskretisiert

$$\int_a^b dx F(x) = \sum_{i=1}^N W(x_i) F(x_i) \quad , \quad (5.16)$$

wobei die x_i und W_i die Stützstellen und Gewichte der Gauß-Quadraturformel sind.

Es erweist sich als notwendig, das Integral über k' mit sehr sorgfältig ausgewählten Stützstellen auszuwerten. So wird der Integralbereich in zahlreiche Intervalle unterteilt, weil andernfalls die Lösung für $Q(\vec{k}, \omega)$, speziell in dem Regime um die Resonanz, problematisch werden kann. Dies ist dann der Fall, wenn die Dämpfung δ sehr klein gegenüber der Bindungsenergie E_x ist.

Das resultierende inhomogene lineare Gleichungssystem wird mit dem Gaußschen-Eliminationsverfahren gelöst (siehe Anhang B). Damit geht Gleichung (5.9) in

$$\sum_{k_j=1}^N A(k_i, k_j, \omega) Q(k_j, \omega) = B(k_i, \omega) \quad (5.17)$$

über, wobei man die Lösung für $Q(\vec{k}, \omega)$ aus der inversen Matrix A erhält

$$Q(k_i, \omega) = \sum_{k_j=1}^N A^{-1}(k_i, k_j, \omega) B(k_j, \omega) \quad (5.18)$$

Hierbei erweist sich das zur komplexen Matrixinversion benutzte Inversionsprogramm (Anhang B) als besonders vorteilhaft [85]. Die Matrix A muß natürlich gut konditioniert sein.

Für die optische dielektrische Funktion ergibt sich schließlich

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\pi e^2}{m \epsilon_g} \sum_{\vec{k}} M(\vec{k}) Q(\vec{k}, \omega) \quad (5.19)$$

Es sei erwähnt, daß in den numerischen Rechnungen statt Q die Vertexfunktion

$$\Gamma(\vec{k}, \omega) = \frac{Q(\vec{k}, \omega)}{Q_0(\vec{k}, \omega)} \quad (5.20)$$

berechnet wurde, was an der Struktur der obigen Gleichungen jedoch nichts ändert.

Aus der dielektrischen Funktion (5.19) folgen dann sofort alle relevanten Größen wie der Brechungsindex

(5.21)

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2} \left[\operatorname{Re} \epsilon(\omega) + \left(\operatorname{Re}^2 \epsilon(\omega) + \operatorname{Im}^2 \epsilon(\omega) \right)^{1/2} \right]}$$

und der Absorptionskoeffizient

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{n(\omega)c} \operatorname{Im} \epsilon(\omega) . \quad (5.22)$$

Im folgenden sollen am Beispiel von Germanium die numerischen Methoden geschildert werden. Zur Beschreibung des direkten Übergangs in Germanium kann die Elektronenbesetzung am Γ -Punkt vernachlässigt werden, womit sich

$$Q_0(\vec{k}, \omega) = M(\vec{k}) \frac{1 - f_n(e_n(\vec{k}))}{\omega - e_e(\vec{k}) - e_n(\vec{k}) + i\delta} \quad (5.23)$$

ergibt. Zur Berücksichtigung von Lebensdauereffekten kann δ hier einfach durch eine endliche Dämpfung γ ersetzt werden, die Spektraldarstellung (5.15) ist nicht notwendig.

Um eine einfachere Resonanzstruktur zu erhalten, führt man eine neue Funktion

$$Q_{00}(\vec{k}, \omega) = M(\vec{k}) \frac{1 - f_n(e_n(\vec{k}))}{\omega - \epsilon_e(\vec{k}) - \epsilon_n(\vec{k}) - \Delta_{e_n}(0) + i\gamma} \quad (5.24)$$

ein und setzt

$$Q(\vec{k}, \omega) = \Gamma(\vec{k}, \omega) Q_{00}(\vec{k}, \omega) \quad (5.25)$$

an. Für Γ ergibt sich dann folgende BSE:

$$\Gamma(\vec{k}, \omega) = 1 - \sum_{\vec{k}'} \frac{I_{en}(\vec{k}, \vec{k}', \omega)}{M(\vec{k})} Q_{00}(\vec{k}', \omega) \Gamma(\vec{k}', \omega) + \frac{[\Delta_{en}(\vec{k}) - \Delta_{en}(0)] \Gamma(\vec{k}, \omega)}{\omega + i\delta - \epsilon_e(\vec{k}) - \epsilon_n(\vec{k}) - \Delta_{e_n}(0)} . \quad (5.26)$$

5. Lösung der Bethe-Salpeter-Gleichung für die Interband-

Je nach Größe von $\tilde{\omega} = \omega - E_g^i = \omega - E_g - \Delta_{eh}(0)$ werden nun verschiedene Diskretisierungen des Integrals $\int dk$ durchgeführt (in exzitonischen Einheiten):

$$I = \int_0^{\infty} dx F(x)$$

1. $\tilde{\omega} \leq 0$

$$\tilde{\omega} \leq -\gamma \quad I = \frac{3}{2} \int_0^1 \frac{dy}{y^{5/2}} F\left(\frac{1}{y^{3/2}} - 1\right)$$

$$\tilde{\omega} > -\gamma \quad I = \int_0^a dx F(x) + \int_a^{\infty} dx F(x) = a \int_0^1 dy F(ay) + I_{\infty}$$

$$I_{\infty} = \frac{3}{2} \int_0^1 \frac{dy}{y^{5/2}} F\left(\frac{1}{y^{3/2}} - 1 + a\right)$$

2. $\tilde{\omega} > 0$

$$\tilde{\omega} \leq \gamma \quad I = b \int_0^1 dy F(by) + (a-b) \int_0^1 dy F((a-b)y + b) + I_{\infty}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\omega} > \gamma \quad I = & c \int_0^1 dy F(cy) + (b-c) \int_0^1 dy F((b-c)y + c) + \\ & + (a-b) \int_0^1 dy F((a-b)y + b) + I_{\infty} \end{aligned}$$

$$a = \sqrt{\tilde{\omega} + \gamma}, \quad b = \sqrt{\tilde{\omega}}, \quad c = \sqrt{\tilde{\omega} - \gamma}.$$

Die einzelnen Integrale werden dabei mit gewöhnlichen Gauß Quadraturformeln berechnet.

Mit dieser Aufteilung wird die Resonanz $\tilde{\omega} = k^2/2m$ gut erfaßt. Zum Test wird der Beitrag von Q_{00} zur dielektrischen Funktion mit obigen Stützstellen berechnet, wobei $f_h(e_h(\vec{k}))$ im Zähler von Q_{00} weggelassen wird. Da sich dieser Beitrag auch analytisch berechnen läßt, bietet sich hier eine gute Möglichkeit, die Güte der Stützstellen, was die Resonanz betrifft, zu

überprüfen. Ein weiterer Test ergibt sich z.B. aus dem Vergleich von numerischer und exakter Exzitonenbindungsenergie.

Wie sich zeigt, sind in der Regel um die hundert Stützstellen ausreichend. Die zu invertierende Matrix ist somit von der Größenordnung 100×100 , was sich noch gut mit Hilfe des Gaußschen-Eliminationsverfahrens bewerkstelligen läßt. Das in den numerischen Rechnungen verwendete Programm (DCMLIN) invertiert komplexe Matrizen, was zu einer wesentlichen Vereinfachung der Rechnungen führt.

6. THEORETISCHE ERGEBNISSE

Dieses Kapitel enthält die theoretischen Ergebnisse zur Intensitätsabhängigkeit der optischen Konstanten von Halbleitern, wobei ein systematischer Vergleich zwischen Experiment und Theorie durchgeführt wird.

In dem folgenden Abschnitt wird stellvertretend für die in dieser Arbeit betrachteten Halbleiter am Beispiel von GaAs der Einfluß von Lokalfeldkorrekturen und dynamischen Effekten kurz geschildert und daran anschließend werden zusätzlich die Ergebnisse für CdS und InSb vorgestellt und diskutiert. Der letzte Punkt wird noch etwas vertieft hinsichtlich der Diskussion der optischen Bistabilität am Beispiel von InSb. In den zwei darauf folgenden Abschnitten werden neben zeitaufgelösten Brechungsindex- und Absorptionsspektren die Ionisation des direkten Exzitons in Germanium behandelt.

In jedem der folgenden Absorptions- wie Brechungsindexspektren wurde bei kleinster Anregungsintensität ($I=0$) und damit bei kleinster Ladungsträgerkonzentration ($n=0$) die Dämpfung so gewählt, daß die Zahl der aufgelösten Exzitonenlinien mit dem experimentellen Befund übereinstimmt. In der gleichen Weise wurde zur Berechnung der Linienform das Übergangsmatrixelement an die 1S-Exzitonenresonanz angepaßt. Liegen diese "Anpassparameter" einmal fest, wird die Dichte als Variationsparameter durchgeföhren. Die verwendeten Materialparameter sind im Anhang A aufgeföhrt.

6.1 DIREKTE HALBLEITER

In Abbildung 12 sind zunächst einige berechnete Absorptionsspektren für verschiedene Ladungsträgerkonzentrationen zusammen mit den Brechungsindexspektren in der Bandkantenregion für GaAs dargestellt. Im Grenzfall niedriger Dichten erkennt man die bekannte Exzitonen-Serie (gepunktete Kurve). Oberhalb der Bandkante stimmen die theoretischen Ergebnisse immer mit der Elliot-Formel überein. Die nächsten Kurven (durchgezogene und strichpunktierte Linie) zeigt das Absorptionsspektrum für mittlere Dichten. Bei der Dichte von $n=1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ist das Exziton noch nicht ionisiert, während die Kurve mit einer Dichte von $n=5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ minimal oberhalb der Mottdichte liegt. Die exzitonische Verstärkung ist für diese Dichte aber immer noch sehr groß, so daß die Bewegung der Elektron-Loch-Paare in diesem Regime noch stark korreliert ist. Diese Tatsache macht es im mittleren Dichtebereich von experimenteller Seite her sehr schwierig, zu entscheiden, ob der aufgelöste Peak im Absorptionsspektrum noch einem gebundenen Zustand zuzuordnen ist oder nicht.

Mit anwachsender Dichte wird die Absorption für $\omega \leq \mu$ negativ. Es entwickelt sich wegen der Inversion optische Verstärkung für Energien, die kleiner sind als das quasichemische Potential. Auf der unteren Abbildung sind die korrespondierenden Brechungsindexspektren dargestellt. Man erkennt starke negative Änderungen des Brechungsindexes unterhalb des 1S-Exzitons. Diese starken dispersiven Änderungen in $n(\omega)$ sind zur Realisierung der optischen Bistabilität in GaAs-Kristallen benutzt worden [35]. Im Gegensatz zu den berechneten Brechungsindexänderungen von InSb beruht in GaAs das optisch nichtlineare Verhalten auf der Abschirmung des Exzitons.

Experimentelle Untersuchungen zu der Intensitätsabhängigkeit der optischen Konstanten wurden von Göbel, Hildebrand, Shah u.a. [14,25]

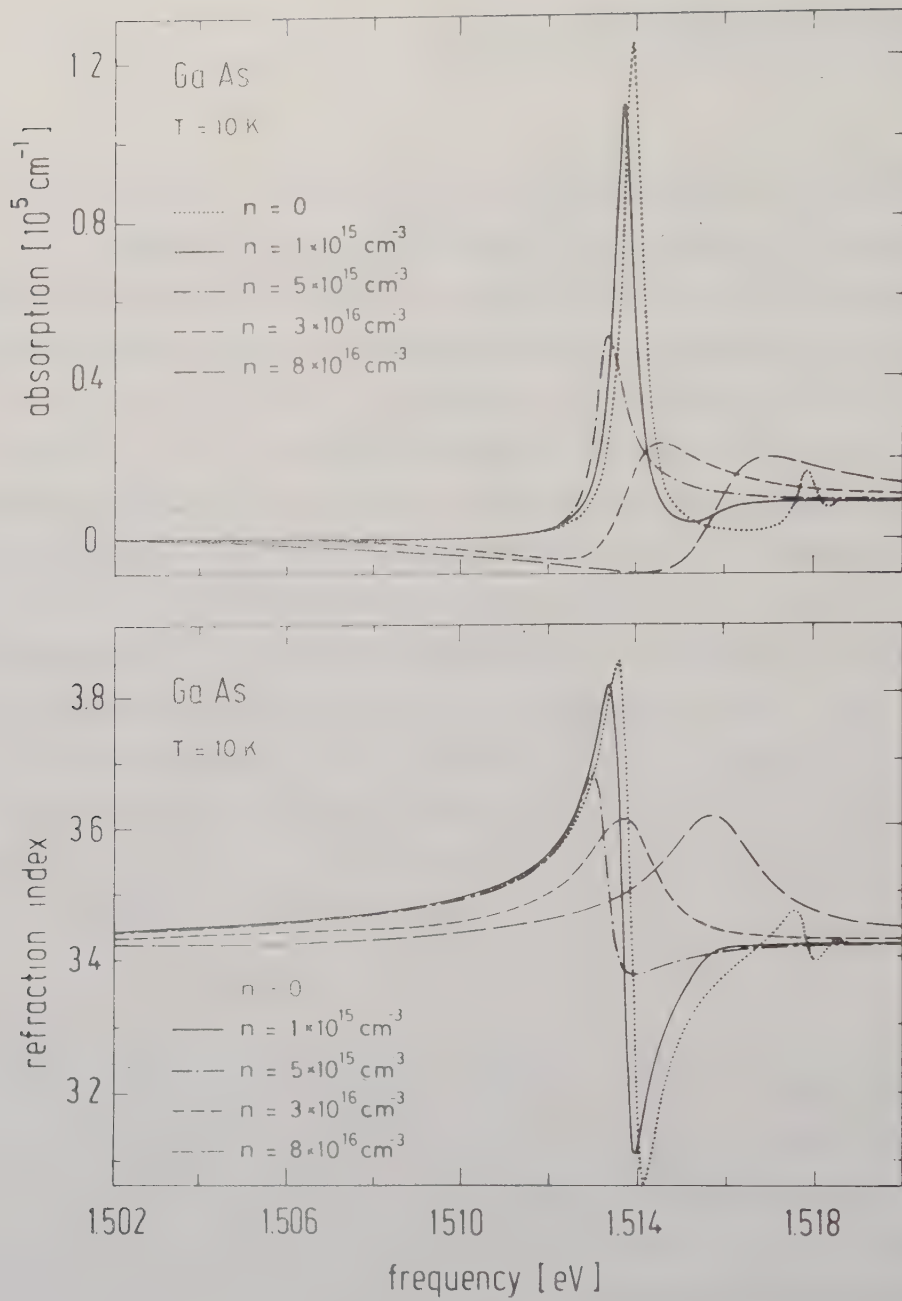


Abbildung 12. : Berechnete Absorptions- und Brechungsindexspektren von GaAs bei einer Temperatur von $T=10\text{ K}$ für verschiedene Ladungsträgerkonzentrationen n .

durchgeführt. Das Resultat dieser Untersuchung ist in Abbildung 13 dargestellt (siehe Diskussion in Kap. 2). Die Abbildung zeigt einige Absorptionsspektren bei fehlender (gepunktete Kurve), mittlerer (durchgezogene Kurve) und bei hoher Anregungsintensität (gestrichelte Kurve).

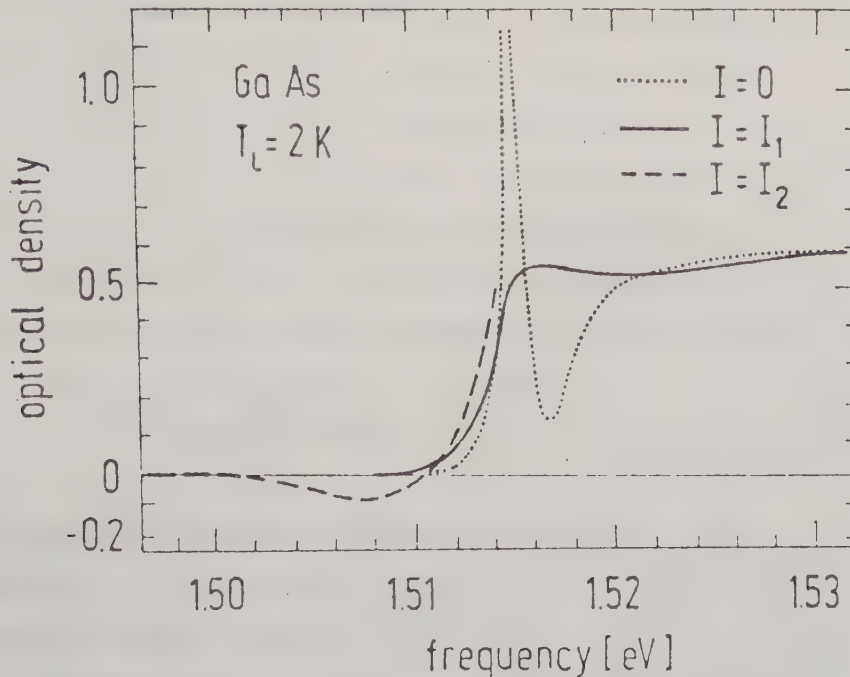


Abbildung 13. : Experimentelle Absorptionsspektren von GaAs bei einer Gittertemperatur von $T_L = 2 K$ für drei verschiedene Anregungsintensitäten I . Die Kurven mit $I=0$ und I_1 sind aus Ref. 25, während $I=I_2$ aus Ref. 14 entnommen ist.

Man findet auch hier mit zunehmender Intensität eine allmähliche Abnahme des exzitonischen Anteils im Absorptionsspektrum, wobei die absolute Lage des Exzitons sich nicht ändert. Die Kurve im mittleren Dichtebereich ist mit Sicherheit oberhalb der Mottdichte, während sich im Hochdichtefall optische Verstärkung ausgebildet hat. Diese kann - wie erwähnt - in direkten Halbleitern zu optischen Verstärkungsfaktoren bis 10^4 cm^{-1} führen.

Aus den experimentellen und den berechneten Ergebnissen ist zu erkennen, daß zumindest ein qualitativer Vergleich möglich ist.

Einige ältere Rechnungen zum Absorptions- und Brechungsindexspektrum von GaAs sind in Abbildung 14 dargestellt [86]. Hier wurden dynamische Effekte durch eine pauschale Erhöhung von D (siehe (3.68)) um einen empirischen Faktor 2.6 erfaßt. Man erkennt, daß die exzitonische Verstärkung hier etwas kleiner ist (D_{eff} ist kleiner als in Abb. 14). Allgemein gilt, daß die Spektren mit sinkender Abschirmung (wachsendes D , etwa durch Lokalfeldkorrekturen und dynamische Korrekturen) nach Blau schieben, wobei gleichzeitig eine Erhöhung der Elektron-Loch-Korrelation stattfindet. Weiterhin ergibt sich eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Spektren für kleinere und mittlere Dichten.

Trotz des Erfolges der hier vorgestellten Theorie bleiben noch offene Fragen, die einer detaillierteren Untersuchung bedürfen. Ein kritischer Punkt der Theorie ist die Lage des Exzitons bei wachsender Anregungsintensität (Rotshift). Hier werden die Grenzen der quasistatischen Näherung sichtbar. Durch die Lösung des dynamischen Problems könnte eine deutliche Verbesserung erzielt werden. Ebenso erscheint es notwendig über RPA und Lokalfeldkorrekturen hinauszugehen und statt der "Ein-Exziton-Näherung" die Beiträge zur Interband- und Intraband-Polarisationsfunktion voll miteinzubeziehen. Dies gilt vor allem im Hinblick auf die quantitative Beschreibung optischer Spektren.

Sowohl die berechneten als auch die experimentellen Spektren für GaAs zeigen, daß intensitätsabhängige Vielteilcheneffekte, wie beispielsweise die Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung, oberhalb der Bandkante unwirksam sind. Die intensitätsabhängigen Änderungen der optischen Konstanten sind immer auf den spektralen Bereich um die Bandkante beschränkt.

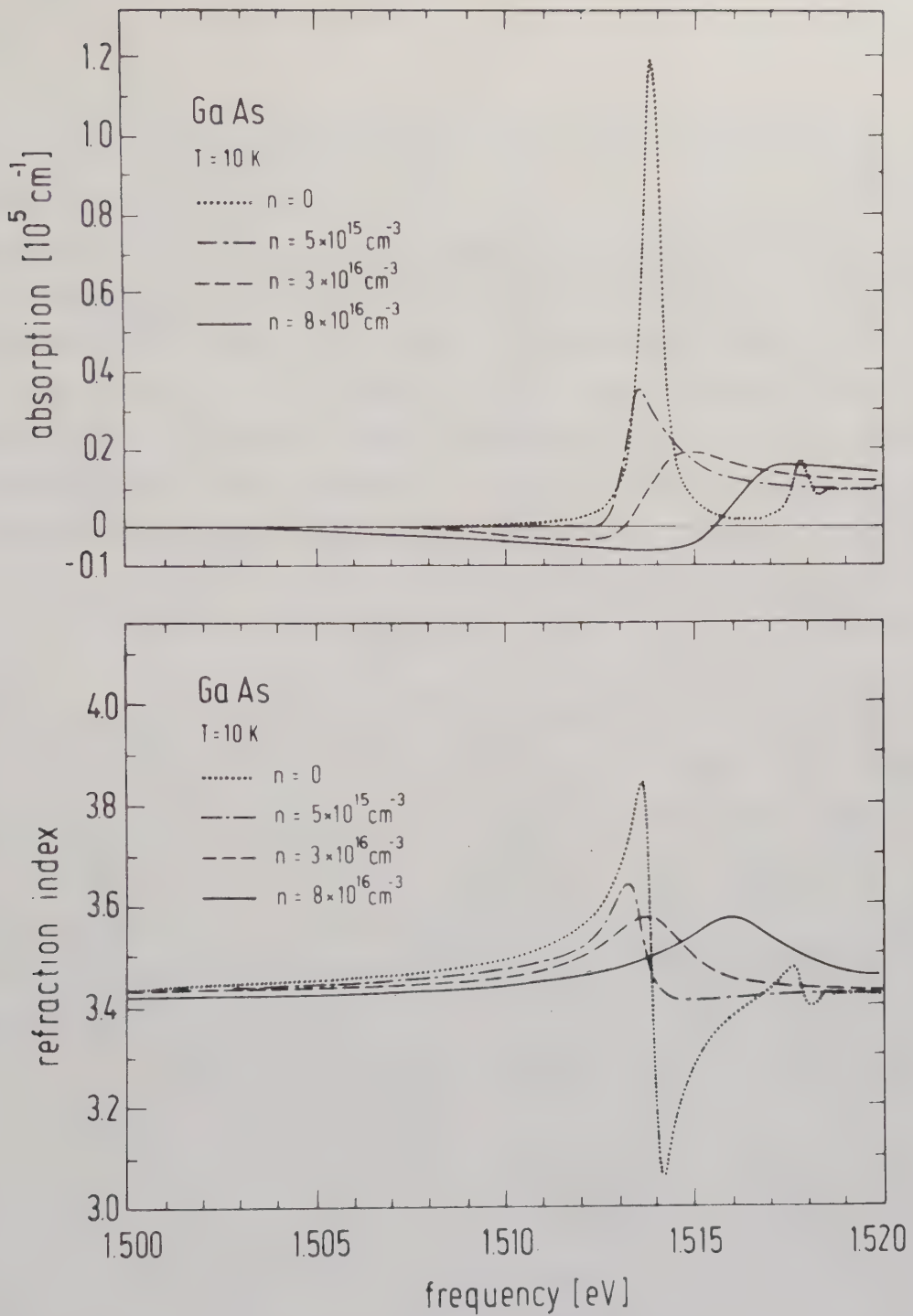


Abbildung 14. : Berechnete Absorptions- und Brechungsindexspektren von GaAs bei einer Temperatur von $T=10\text{ K}$ für verschiedene Ladungsträgerkonzentrationen n (siehe Text).

Dies bestätigt auch die Linienform der optischen Spektren von CdS [31]. Man erhält sehr ähnliche Ergebnisse im Vergleich zu GaAs. Abbildung 15 zeigt für verschiedene Ladungsträgerkonzentrationen bei einer Temperatur von $T_L=60\text{K}$ die optischen Konstanten in der Nähe der Bandkante. Zusätzlich zu den üblichen Bandparametern wurden die optische und die Zustandsdichtemasse berücksichtigt. Wie zu erkennen ist, ist die Änderung der optischen Spektren mit zunehmender Dichte zumindest in qualitativer Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen (siehe Abschnitt 2.1 und Abb. 2 und 3). Die großen dispersiven Änderungen unterhalb des 1S-Exzitons zeigen deutlich an, daß auch in CdS optische Bistabilität zu erwarten ist.

Die oben geschilderten Ergebnisse der Vielteilchentheorie im Falle hoher Temperaturen sind in der Lage, die beobachteten optischen Nichtlinearitäten gut zu erklären. Andere Theorien, wie beispielsweise das freie Elektron-Loch-Paar-Modell, scheiden aus, da sie z.B. den dominanten Effekt im Grenzfall verschwindender Lichtintensität (anziehende Coulomb-Wechselwirkung) total vernachlässigen [87]. Zum Verständnis der optischen Nichtlinearitäten von hochangeregten Halbleitern ist es unbedingt notwendig, Vielteilcheneffekte zu berücksichtigen.

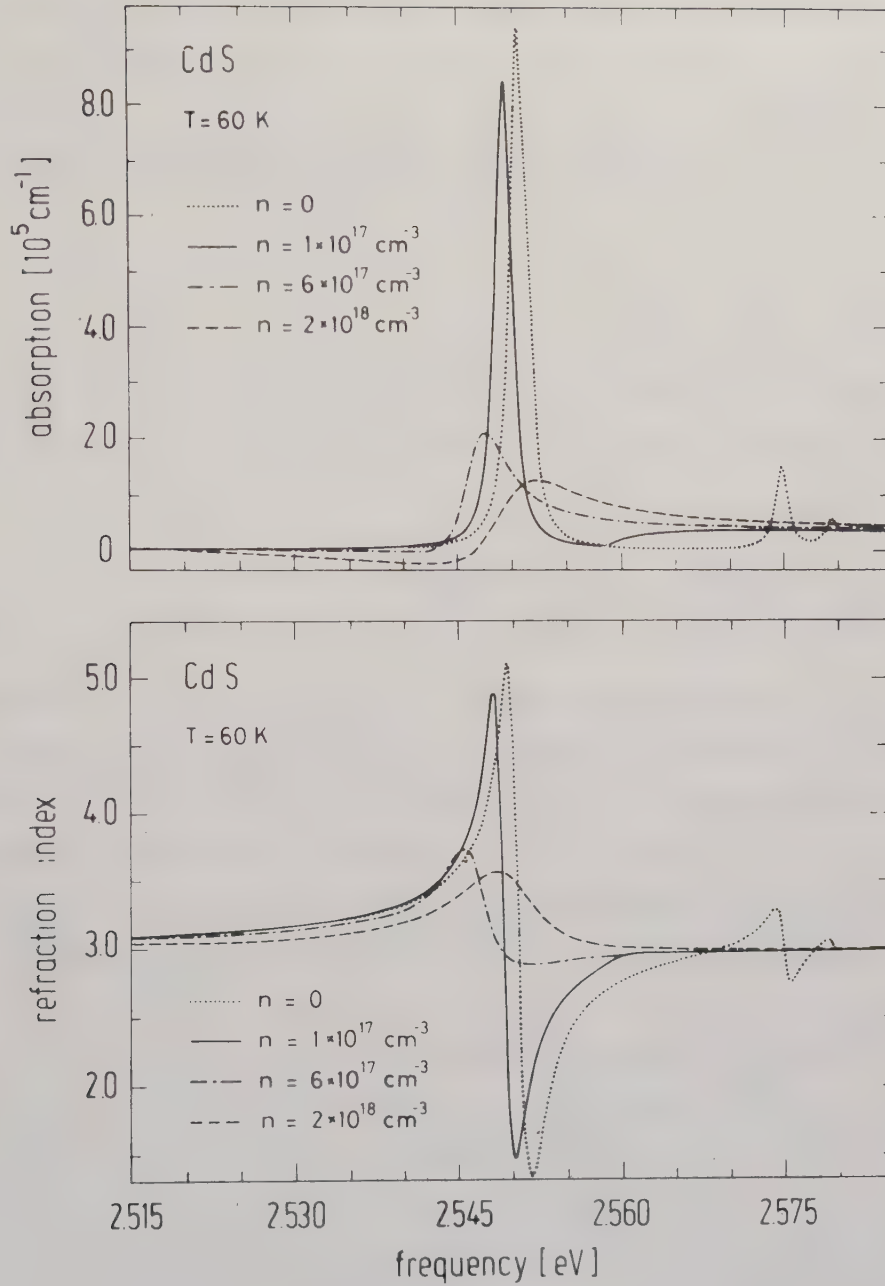


Abbildung 15. : Berechnete Absorptions- und Brechungsindexspektren von CdS bei einer Temperatur von $T=60\text{K}$ für verschiedene Ladungsträgerkonzentrationen n

Wie der nachfolgende direkte Vergleich von Theorie und Experiment zeigt, werden die optischen Spektren von InSb nahezu vollständig beschrieben. Mit diesem Vergleich, der wesentliche Aussagen zur optischen Bistabilität zuläßt, wird die Diskussion der stationären Anregung abgeschlossen.

Dabei wird zunächst, zur Berechnung der optischen Konstanten, der Zusammenhang zwischen der Dichte der freien Ladungsträger und der Lichtintensität hergestellt. Für die Rechnungen nimmt man dabei an, daß sich bei gegebener Dichte n die interne Lichtintensität I_i wie folgt verhält [88]:

$$\alpha(\omega_{exc}, n) I_i = \omega_{exc} B n^2, \quad (6.1)$$

wobei ω_{exc} die Anregungsfrequenz des Lasers und B die bimolekulare Rekombinationskonstante (Anhang A) ist [89]. Abbildung 16 zeigt die intensitätsabhängigen optischen Spektren im Bereich des 1S-Exzitons [86]. Bei InSb ist zu beachten, daß die Lebensdauerverbreiterung (Dämpfung) in der Größenordnung der Exzitonenbindungsenergie liegt. Das Exziton ist somit nicht aufgelöst. Dies wird durch die experimentellen Befunde gedeckt (siehe auch Diskussion in Abschnitt 2.2). Man sieht, daß bis zu Intensitäten von 50 W/cm^2 (Dichte $n=1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) kaum optische Verstärkung vorhanden ist. Die intensitätsabhängigen Brechungsindexspektren zeigen unterhalb des "1S-Exzitons" die Nichtlinearitäten, die zur optischen Bistabilität führen. Bei der gegebenen Laserfrequenz ω_{exc} (hier wurde $\omega_{exc} = 225 \text{ meV}$ gewählt) ist die Brechungsindexänderung Δn immer negativ, während man oberhalb des "1S-Exzitons" positive Δn erhält.

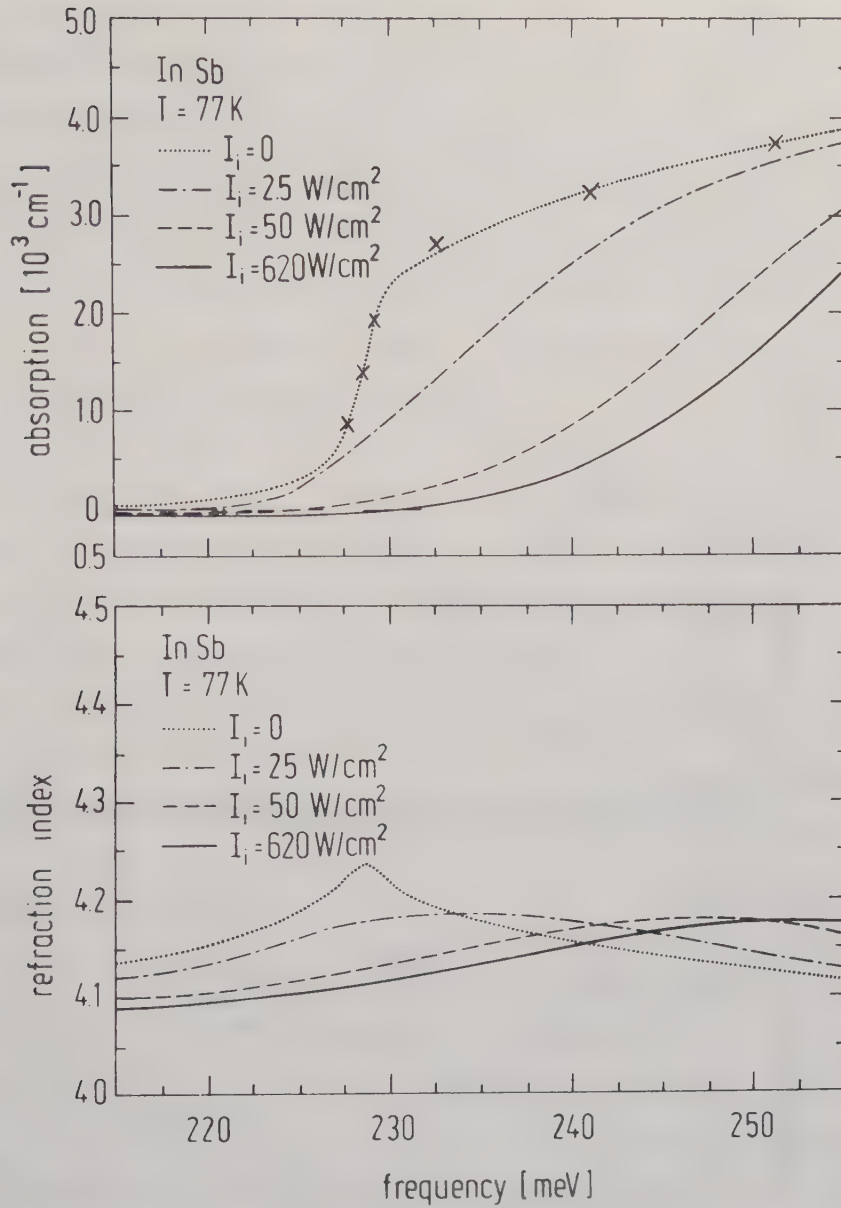


Abbildung 16. : Berechnete Absorptions-und Brechungsindexspektren von InSb bei einer Temperatur von $T=77\text{ K}$ für verschiedene Anregungsintensitäten I_i . Als Pumpfrequenz wurde $\omega_{\text{exc}}=225\text{ meV}$ gewählt. Die experimentellen Daten (Kreuze) sind aus Ref.90 entnommen.

Aus der nichtlinearen Relation (6.1) erhält man dann das nichtlineare Verhalten der optischen Konstanten als Funktion der internen Intensität. Abbildung 17a zeigt den deutlich zu erkennenden Sättigungsmechanismus der Ladungsträgerkonzentration bei relativ hohen Intensitäten. Der Bereich, in dem die Nichtlinearitäten am stärksten sind, befindet sich zwischen 10 und 100 W/cm².

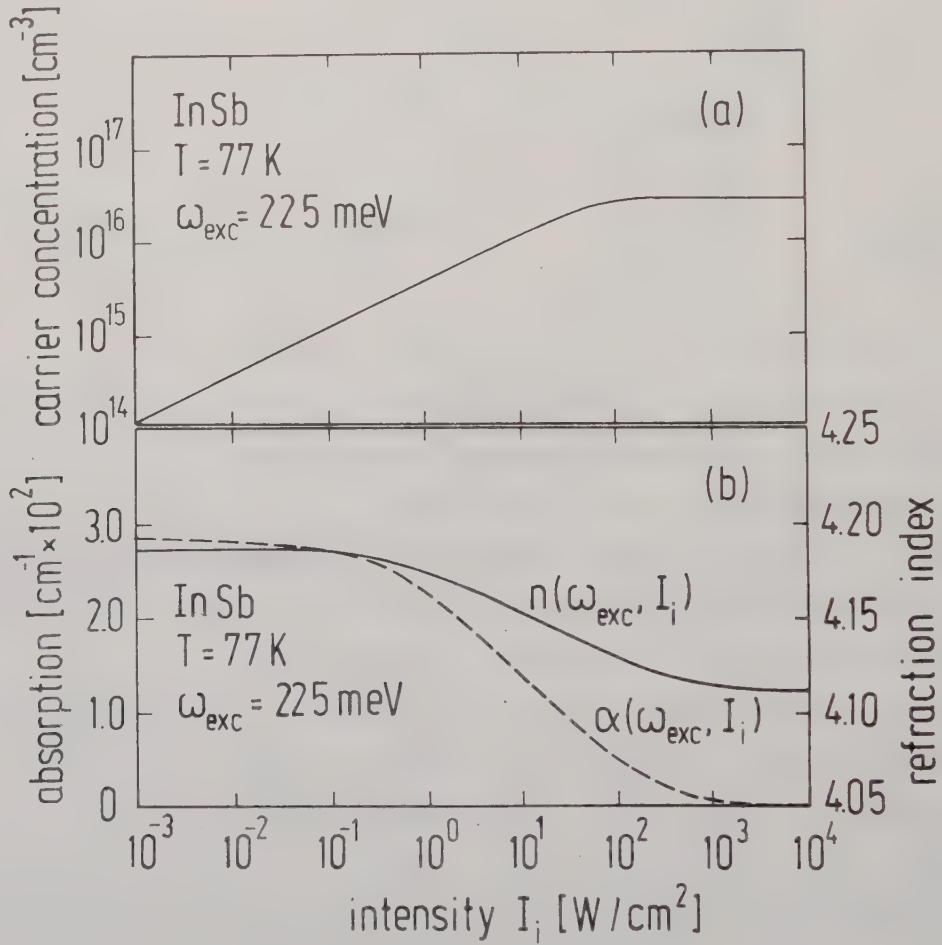


Abbildung 17. : a) Ladungsträgerdichte; b) Absorption $\alpha(\omega_{exc}, I_i)$ und Brechungsindex $n(\omega_{exc}, I_i)$ bei $\omega_{exc} = 225$ meV gegen die interne Anregungsintensität I_i von InSb bei T=77K aufgetragen (lt. Ref. 86).

Die Änderungen des Brechungsindex und der Absorption mit der Intensität bei der gegebenen Laserfrequenz ω_{exc} sind in Abbildung 17b dargestellt. Bei kleinen Intensitäten zeigt der Absorptionskoeffizient ein langsames

Abfallen (die Bandauffüllung findet statt), er fällt dann schneller mit wachsender Intensität und geht schließlich gegen Null (der Kristall ist transparent; Bleaching). In Einstrahl-Experimenten befindet man sich natürlich immer in einem Regime $\omega \geq \mu$, in dem $\alpha(\omega)$ positiv ist, d.h. die Bänder können nur gefüllt werden mit der "Ein-Photonen-Absorption" bis zu Photonen-Energien der Anregungsfrequenz [22,91]. Die Änderung des Brechungsindex mit der Intensität zeigt ein ähnliches Verhalten, auch dieser konvergiert gegen einen endlichen Wert.

Die gewonnenen Ergebnisse können direkt mit dem Experiment verglichen werden. Die in Abbildung 18 dargestellten Dreiecke sind die experimentellen Daten von Miller et al. [92] und die durchgezogene Kurve ist der berechnete nichtlineare Brechungsindex [86]. Die beste Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment wurde bei einer mittleren Intensität zwischen 30 und 50 W/cm² erzielt. Zur experimentellen Bestimmung von $n(\omega)$ wird eine lineare Näherung bezüglich I angenommen, gemäß

$$n(\omega) = n_0(\omega) - n_2 I . \quad (6.2)$$

Die Funktion $n_0(\omega)$ beschreibt die lineare Änderung und $n_2(\omega)$ die nichtlineare Änderung des Brechungsindex mit der Intensität.

Zum systematischen Vergleich zwischen Experiment und Theorie wird der aus dem Experiment gewonnene nichtlineare Brechungsindex $n_2(\omega)$ mit der negativen Ableitung des berechneten Brechungsindex gleichgesetzt:

$$n_2(\omega) = - \frac{dn(\omega)}{dI} . \quad (6.3)$$

Die Diskrepanzen in Abb. 18 sind möglicherweise auf die im Experiment verwendeten unterschiedlichen Kristalldicken, und auf die Art der Auswertung der experimentellen Daten zurückzuführen.

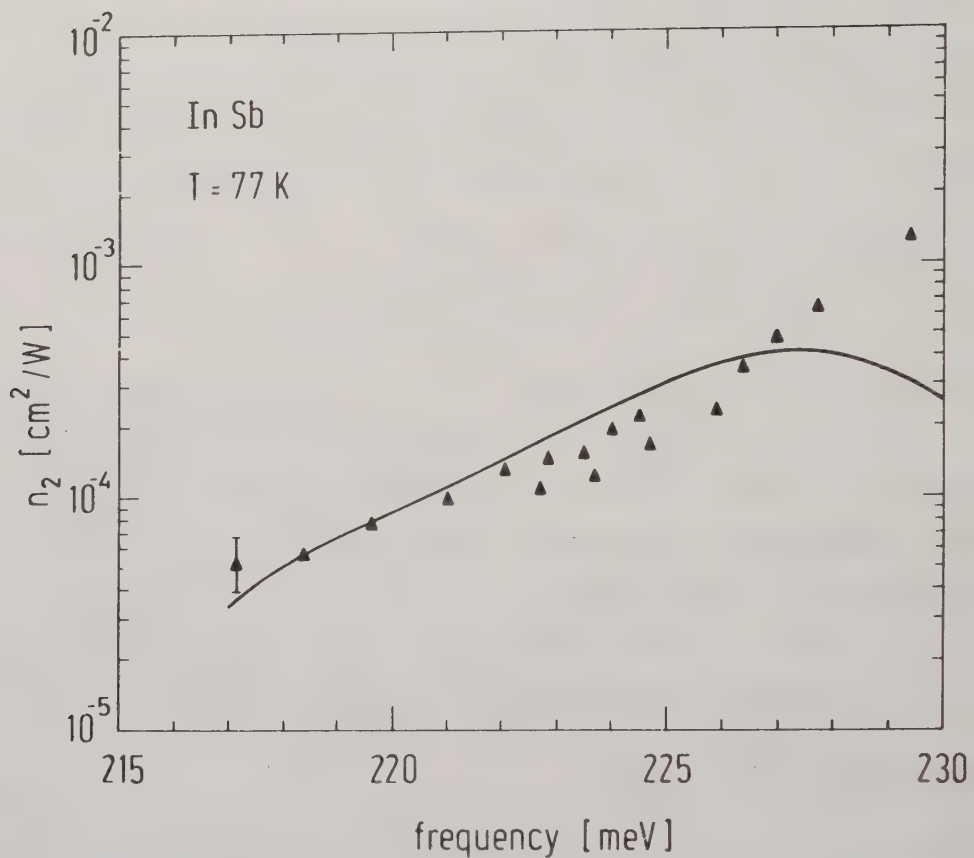


Abbildung 18. : Vergleich der berechneten Brechungsindexänderungen des gemittelten Brechungsindexspektrums $-dn/dI$ für Intensitäten zwischen 30 und 50 W/cm² mit dem gemessenen nichtlinearen Brechungsindex n_2 . Die experimentellen Daten von InSb bei T=77K sind aus Ref. 92 entnommen.

Allgemein läßt sich feststellen, daß sich die in GaAs und InSb beobachtete optische Bistabilität mit der hier vorgestellten Vielteilchentheorie einheitlich beschreiben läßt. In beiden Fällen besteht eine generell gute Übereinstimmung.

Die bisherige Diskussion der optischen Eigenschaften orientierte sich an den Ergebnissen von GaAs und InSb. Die obigen Aussagen gelten jedoch auch für andere direkte Halbleiter.

Die bisherigen Ausführungen dieses Kapitels bezogen sich ausschließlich auf die Betrachtung quasistationär angeregter Ladungsträgerkonzentrationen, d.h. man konnte die Konzentration der gebundenen und freien Elektron-Loch-Paare sowie die Temperatur als zeitabhängige Variablen betrachten. Will man zeitaufgelöste, intensitätsabhängige Spektren im Piko- und Subpikosekunden-(Femtosek.) Bereich untersuchen, muß man sowohl Dichte als auch Temperatur als zeitabhängige Variablen betrachten, da z.B. Abkühleffekte die optischen Eigenschaften des Kristalls stark beeinflussen [93-98]. So ist beispielweise mit fallender Temperatur eine Zunahme der Abschirmung direkt verknüpft. Die Änderung der Abschirmung mit der Temperatur bei Subpikosekunden Experimenten ist jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit (detaillierte Daten für CuCl sind in Ref. 99 zu finden). Stattdessen wird die Theorie im Hinblick auf die zeitaufgelöste Nanosekunden-Spektroskopie untersucht, bei der die Temperatur als stationäre Größe betrachtet wird.

6.2 ZEITAUFGELÖSTE SPEKTREN

In den letzten beiden Abschnitten wurde in einer kurzen Zusammenstellung dargelegt, wie sich die optischen Eigenschaften von Halbleitern unter stationärer Anregung verhalten. Im folgenden wird gezeigt, wie sich die optischen Konstanten unter zeitabhängigen Lichtintensitäten verändern. Hierbei wird stellvertretend für alle direkten Halbleiter die Substanz GaAs gewählt, die für diesen Zweck besonders gut geeignet ist. Sie besitzt ein charakteristisches 1S-Exziton, das im Absorptionsspektrum als ausgeprägte scharfe Struktur hervortritt, die von den restlichen Absorptionsstrukturen deutlich getrennt ist.

Als Generationsrate wurde folgende Form gewählt

$$G(t) = G_{exc} [\cosh(\alpha_0 t / t_p)]^{-1} \quad (6.4)$$

mit $\alpha_0 = 2 \operatorname{arccosh} 2$. $t_p = 5 \text{ ns}$ ist die Halbwertbreite des Pulses und G_{exc} die maximale Generationsrate. Hier wurde ein Wert von $G_{exc} = 1.3 \cdot 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ angenommen. Die Ladungsträgerkonzentration wird mit Hilfe folgender einfacher Ratengleichung bestimmt [100,101]:

$$\dot{n}(t) = G(t) - n^2(t) B - n(t) / \tau \quad (6.5)$$

B ist die bimolekulare Rekombinationskonstante und τ die Lebensdauer der Ladungsträger ($\tau = 1 \text{ ns}$) [98,102]. Durch Integration der nichtlinearen Differentialgleichung (6.5) kann man die in dem Kristall befindliche Ladungsträgerkonzentration n bestimmen. Im Falle der Pikosekunden-Spektroskopie könnte man auf Grund der großen Lebensdauer τ den Term linear in der Dichte vernachlässigen.

Zur Anpassung des Absorptionsspektrums bei fehlender Anregungsintensität diene ein aus einer zeitaufgelösten Pikosekunden-Messung gewonnenes

Absorptionsspektrum (Abb. 19) [22]. Die Punkte sind die berechneten Werte. Für den Zentralbereich der Absorptionsbande ist deutlich eine Lorentzkurve zu erkennen, während sich im niederenergetischen Bereich die Absorptionskante nicht mit dieser Linienform beschreiben läßt. Vielmehr stellt man fest, daß die Absorptionskante exponentiell mit der Frequenz ansteigt (Urbach-Regel) [1,103].

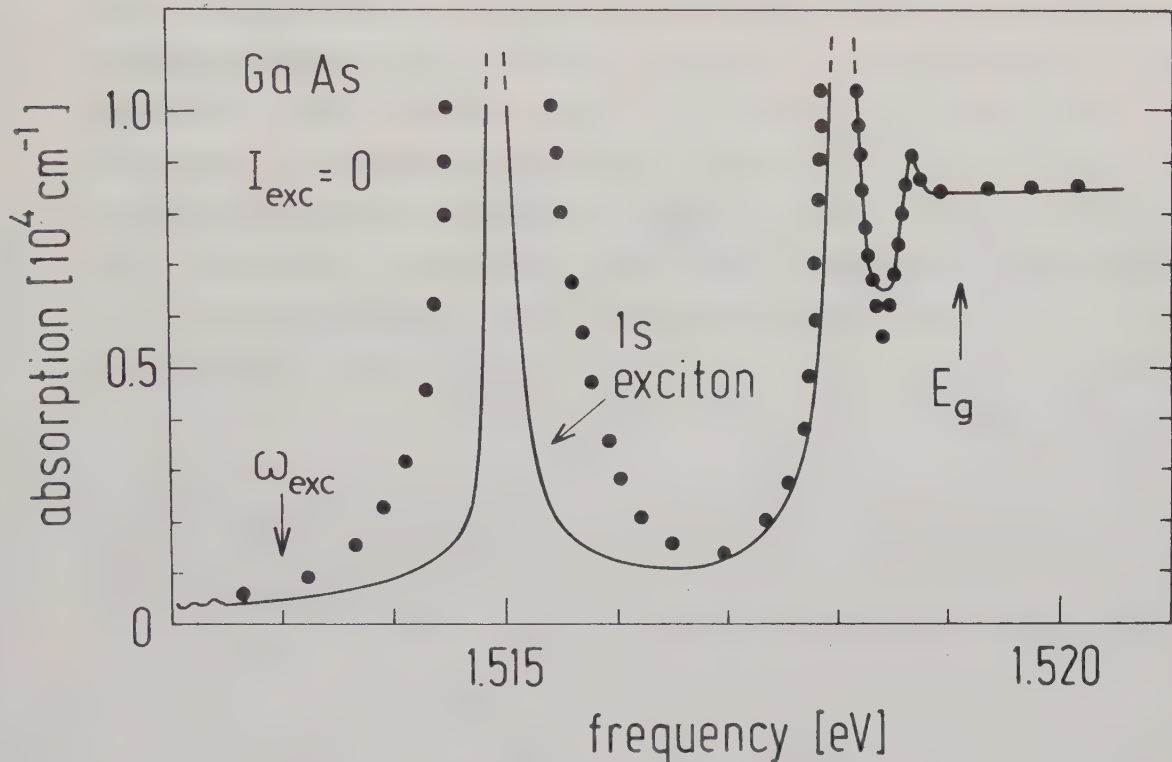


Abbildung 19. : Berechnetes Absorptionsspektrum im Grenzfall verschwindender Anregungsintensität $G_{\text{exc}} = 0$ von GaAs.

Das dynamische Verhalten der optischen Konstanten unter den genannten Anregungsbedingungen zeigen die zeitaufgelösten Absorptions- und Brechungsindexspektren im Bereich der Bandkante (Abb. 20). Die in Abbildung 20 am rechten oberen Rand eingesetzte Figur beschreibt das

Dichteverhalten mit der Zeit. Wie man klar erkennt, ist das Maximum der Dichte ($n=10^{17} \text{ cm}^{-3}$) um 2 ns zur Generationsrate verzögert. Wegen der linearen Rekombination fällt danach die Dichte mit ansteigender Zeit relativ schnell wieder ab. Mögliche Auger-Prozesse sind zu vernachlässigen, da sie erst bei sehr hohen Dichten dominieren [104,105].

Das zeitaufgelöste Absorptionsspektrum in Abbildung 20 zeigt die bekannten Exzitonen-Serien unterhalb der Bandkante. Wie zu erkennen ist, setzt der Ionisationsprozeß schon bei relativ kleinen Generationsraten ein. Die exzitronische Verstärkung wird reduziert und flacht schließlich völlig ab. Es kommt zur Ausbildung eines entarteten Plasmas und zu optischem Gain [106-108]. Das zeitaufgelöste Brechungsindexspektrum zeigt ähnliche starke Änderungen unter- und oberhalb des 1S-Exzitons. Die exzitronischen Beiträge zum Brechungsindex werden mit wachsender Zeit vermindert, bis man schließlich einen nahezu strukturlosen Brechungsindex beobachtet [109].

Mit diesen Bemerkungen zur zeitaufgelösten Nanosekunden- Spektroskopie soll die Untersuchung der intensitätsabhängigen optischen Konstanten von direkten Halbleitern abgeschlossen werden.

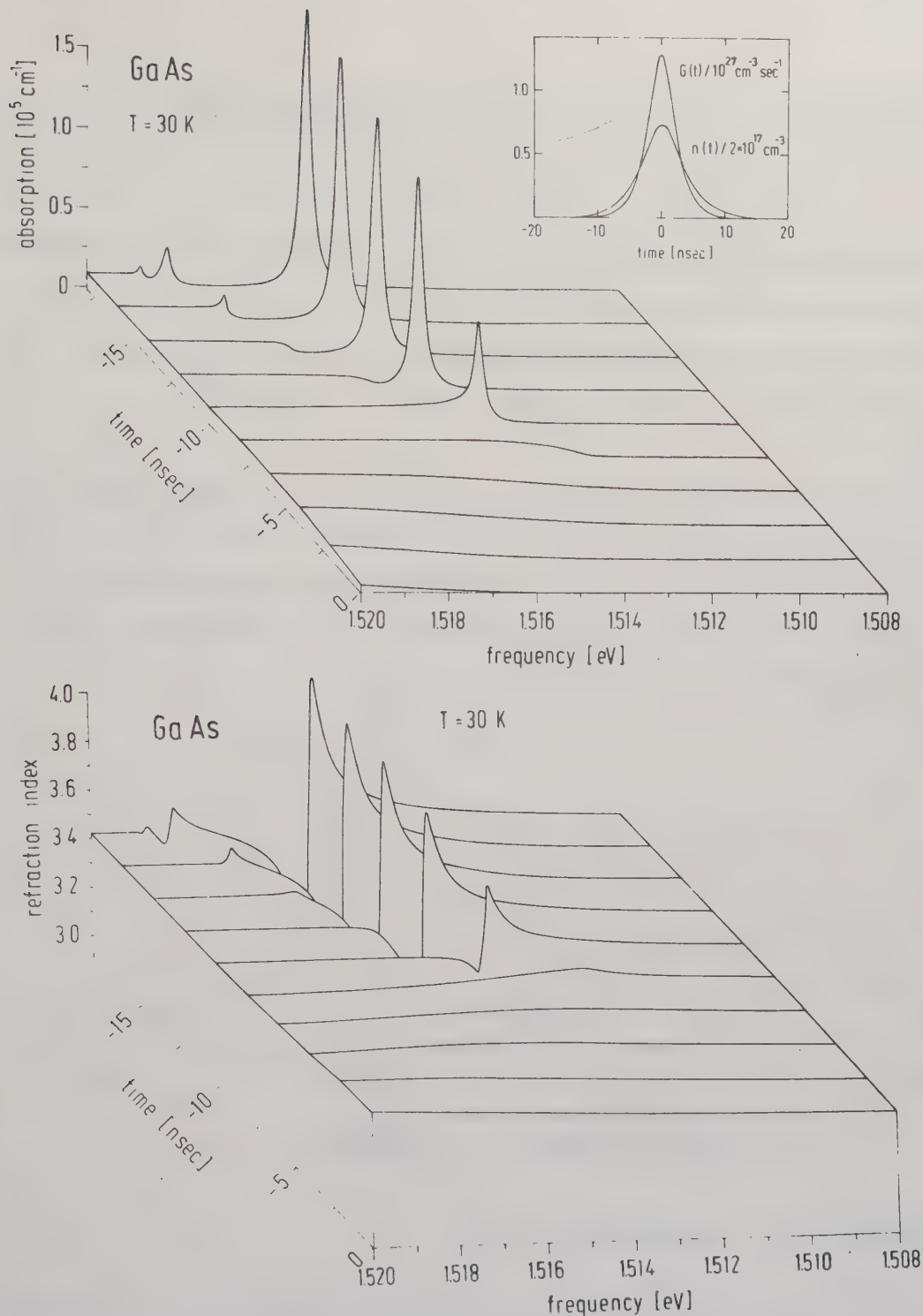


Abbildung 20. : Berechnete zeitaufgelöste Absorptions- und Brechungsindexspektren von GaAs bei einer Temperatur von $T=30\text{K}$. Die maximale Generationsrate beträgt: $G_{\text{exc}}=1.3 \times 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Die Figur rechts oben zeigt Dichte- und Generationsverhalten im Nanosekundenregime.

6.3 IONISATION DES DIREKTEN EXZITONS IN GERMANIUM

Während sich die bisherigen Betrachtungen mit den optischen nichtlinearen Eigenschaften von direkten Halbleitern befaßten, beschäftigt sich dieser Abschnitt mit der Intensitäts- und Temperaturabhängigkeit der Ionisation des direkten Exzitons in dem indirekten Halbleiter Germanium.

Bandfülleffekte am Γ -Punkt können hier vernachlässigt werden, da die optisch angeregten Elektronen in das indirekte Minimum am L-Punkt relaxieren. Das direkte Exziton wird im wesentlichen von den L-Punkt Elektronen abgeschirmt. Die Bandstruktur von Ge ist in Abbildung 21 dargestellt.

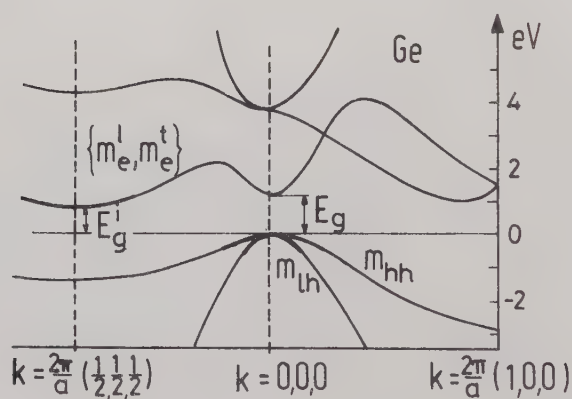


Abbildung 21. : Bandstruktur von Ge

Abbildung 22 zeigt einige gemessene Spektren von Schweizer bei $T_L = 30\text{K}$ für Anregungsintensitäten von $I=0$, 10 mW, 30 mW und 150 mW (gekennzeichnet durch $\times, \bullet, \blacksquare, \blacktriangle$) [110]. Wie man sieht, verschwindet mit ansteigender Lichtintensität die exzitonische Absorption, es findet die Ionisation des Exzitons statt. Die durchgezogenen Linien stellen die theoretischen Er-

gebnisse dar. Wie man erkennt, ist die Übereinstimmung im gesamten Dichte- und Temperaturbereich erstaunlich gut (das Dipolmatrixelement (5.7) wurde bei der Anpassung von $I=0$ um den Faktor 1.5 verkleinert).

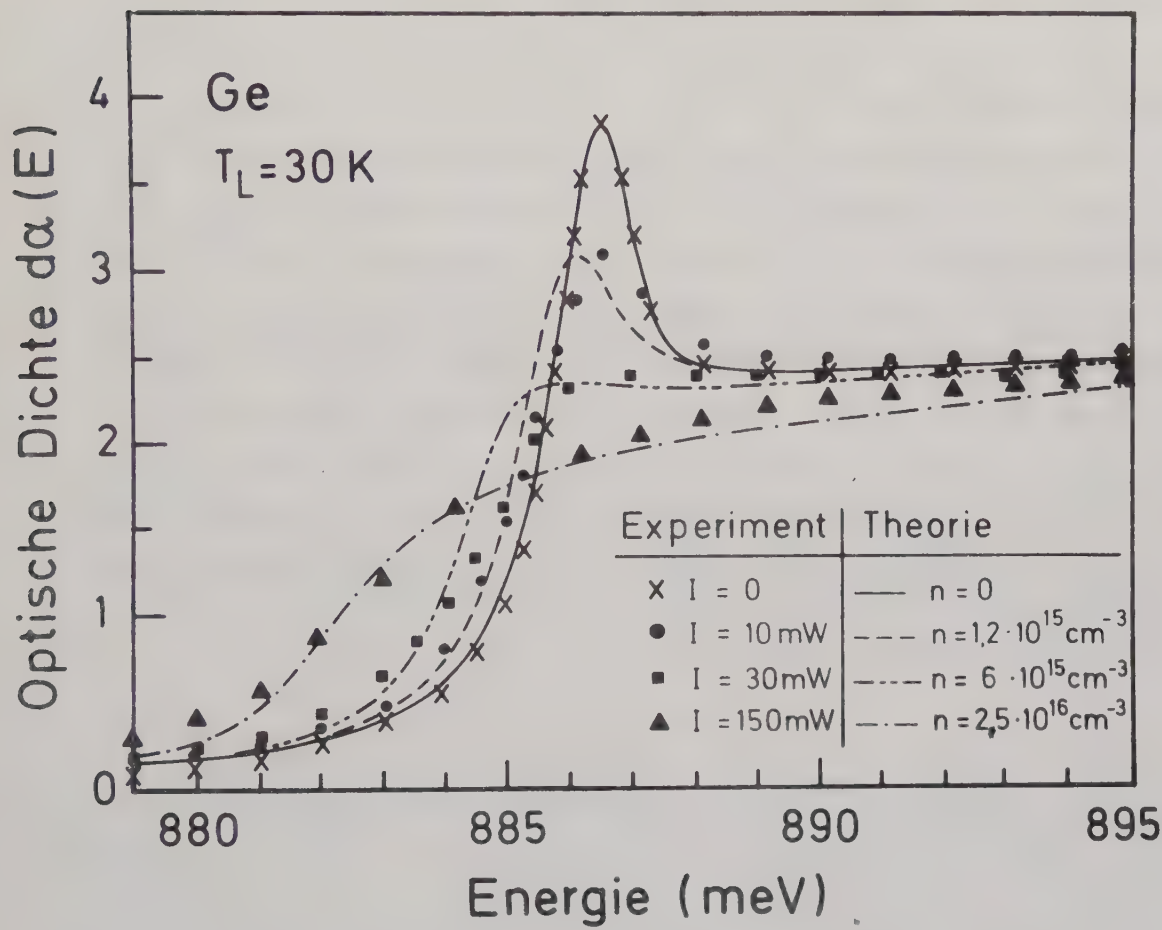


Abbildung 22. : Experimentelle und berechnete Absorptionsspektren an der direkten Bandkante von Ge bei einer Gittertemperatur von $T_L=30\text{K}$ für verschiedene Anregungsintensitäten I (lt. Ref. 110).

Allerdings ist in der Nähe der Ionisationsdichte eine kleine Diskrepanz (< 0.3 Rydberg) in Form eines Rotshifts zu erkennen (siehe Diskussion Abschnitt 6.1). Dieser Rotshift ergibt sich wegen der nicht perfekten Kompensation zwischen Selbstenergie- und Vertexkorrekturen im mittleren Dichtebereich ($n=1.2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Auch wird die Verbreiterung der Exzitonenlinie mit ansteigender Intensität von der Theorie natürlich nicht geliefert. Bei Intensitäten von 150 mW ist das Exziton vollständig ionisiert (Plasmadichte $n=2.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Außerhalb des Ionisationsregimes ist die Diskrepanz geringer. Für ein quantitatives Verständnis der obigen Fakten sind in Abbildung 23 die Exzitonenbindungsenergie und die renormierte Bandkante als Funktion der freien Ladungsträgerkonzentration für verschiedene Temperaturen dargestellt. Wie man deutlich erkennt, bleibt die Exzitonenbindungsenergie relativ lange unempfindlich gegen eine Dichteerhöhung, da die gebundenen Elektronen und Löcher einen neutralen Komplex bilden, der nur schwach durch die geladenen Ladungsträger beeinflusst wird. Erst wenn die Energie der Ladungsträger in die Nähe der Exzitonenbindungsenergie rückt, ergibt sich eine spürbare Absenkung des Exzitonenniveaus.

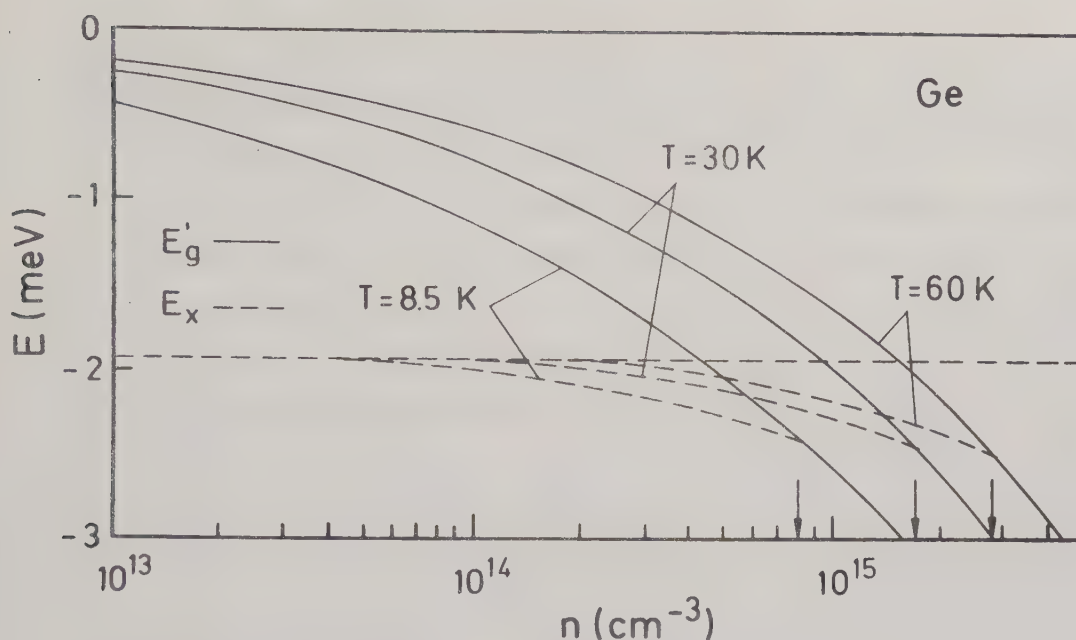


Abbildung 23. : Berechnete Daten zur renormierten Bandkantenenergie E_g' und zur Exzitonenenergie E_x als Funktion der freien Ladungsträgerkonzentration n . Die Pfeile markieren die kritischen Ionisationsdichten (lt. Ref.110).

Die kritische Dichte, bei der die Exzitonenbindungsenergie in das Kontinuum eintaucht, ergibt die Mottdichte (mit Pfeilen angedeutet).

Abschließend werden einige Ionisationskriterien diskutiert. Dabei erhält man, wie aus Abbildung 24 zu entnehmen ist, sowohl für die Mottdichte selbst, als auch für deren Temperaturabhängigkeit Resultate, die überraschend gut mit den einfachen "Debye-Hückel"-Ergebnissen (statisches Mottkriterium $q_D a_0 = 1.19$ mit (3.71), Kurve b) übereinstimmt [111]. Die Kurve $n(T)$, die man aus dem hier vorgestellten Ionisationskriterium $E_x = E_g'$ gewinnt (Kurve a), stimmt mit den Ergebnissen aus einer Rechnung von Zim-

mermann (Entwicklung nach kleinen Dichten) gut überein. E'_g ist hier die renormierte Bandkante des direkten leeren Leitungsbandes am T-Punkt. Kurve c zeigt das phänomenologische Kriterium, bei dem man annimmt, daß die Ionisation des Exzitons dann einsetzt, wenn das Absorptionsspektrum flach ist (Abb. 22, $n=6 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Die flachen Spektren zeigen zwar eine ähnliche Temperaturabhängigkeit mit $E_x = E'_g$, aber wie die theoretischen Ergebnisse klar zeigen sind die entsprechenden Dichten um einen Faktor 4 zu groß.

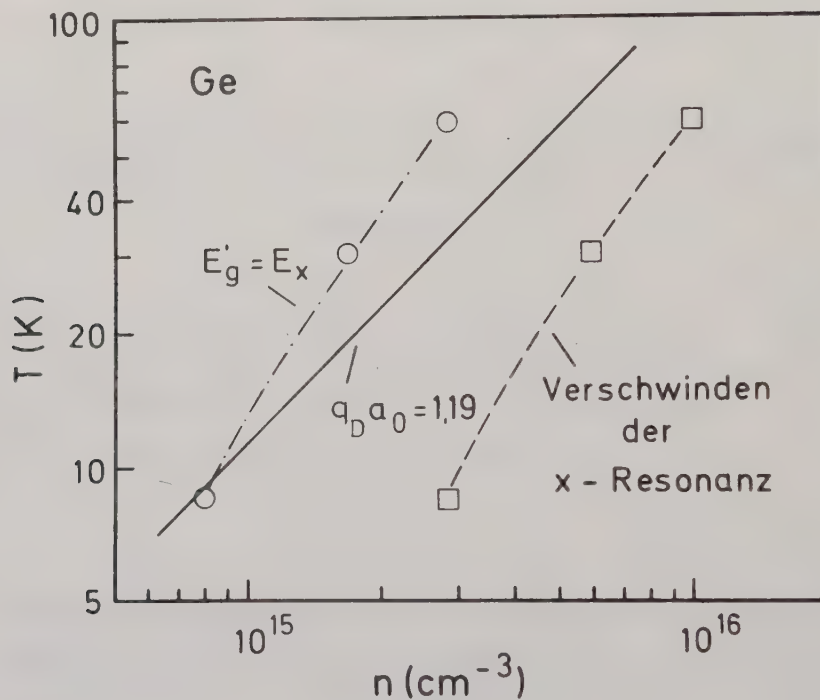


Abbildung 24. : Temperatur als Funktion der freien Ladungsträgerkonzentration n für unterschiedliche Ionisationskriterien: a) $E_x = E'_g$, b) $q_D a_0 = 1.19$ und c) Verschwinden der Exzitonenresonanz (lt. Ref. 110)

A ZUSAMMENSTELLUNG DER VERWENDETEN MATERIALPARAMETER

	E_g (meV)	ϵ_0	ϵ_∞	m_e (m_0)	m_h (m_0)	γ (E_x)
GaAs	1519.2	12.35	10.9	0.067	0.54	0.05
CdS	2583.0	8.58	8.0	0.205	1.1	0.02
InSb	230.0	17.05	15.7	0.0145	0.4	2.0
CuCl	3354.0	6.0	6.3	0.5	2.0	0.02
Ge [112]	888.4	15.3	16.8	0.037	0.35	0.48

B FORTRAN-PROGRAMM ZUR LÖSUNG DER INTEGRALGLEICHUNG FÜR DIE INTERBAND-POLARISATIONSFUNKTION

LIST OF CONTENTS OF DATASET UF66.GERM.FORT (GERM)

```
SUBROUTINE GERMAN(XN,XT,XLFC,XOS,XDO,IOX,IOUT)
IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z)
REAL DISC1(20),DISC2(20),DISC3(20),DISC4(20),DISC5(20)
DIMENSION XX(100),WX(100),YY(2,2)
DIMENSION X9(90),W9(90),X8(80),W8(80),X4(40),W4(40),X1(10),W1(10)
COMMON/INPUTO/PI,EPSO,EPSUN,GAM,EO,EG,CONST,IN
COMMON/INPUT/YY,KT,MUH,MR,N,EGS
COMMON/OUTO/EPSREO,EPSIMO,ABSO,NREO,REFLO,RESRE,RESIM
COMMON/OUT/EPSRE,EPSIM,ABS,NRE,REFL
```

DIESES PROGRAMM LOEST DIE INTEGRALGLEICHUNG FUER DIE KOMPLEXE
INTERBAND-POLARISATIONSFUNKTION MIT HILFE EINER MATRIXINVERSION
UNTER BERUECKSICHTIGUNG VON LOKALFELDKORREKTUREN.

EINGABEPARAMETER:

XN	FREIE LADUNGSTRAEGERKONZENTRATION
XT	TEMPERATUR
XLFC	LOKALFELDKORREKTUREN OHNE BERUECKSICHTIGUNG VON LFC : LFC=1.D0
XOS	FREQUENZ
XDO	FREQUENZSCHRITTE
IOX	ZAHL DER ZU BERECHNENDEN PUNKTE
IOUT	AUSGABEPARAMETER IOUT=0 AUSDRUCK OHNE DATENSPEICHERUNG IOUT=1 AUSDRUCK MIT DATENSPEICHERUNG

DAS PROGRAMM BENOETIGT FOLGENDE UNTERPROGRAMME

XGAUSS(X,X,W,IN)	BERECHNET DIE STUETZSTELLEN UND GEWICHTE FUER GAUSS-QUADRATUR FORMELN
XMUE(MH,N,T,MUH)	BERECHNET DAS QUASICHEM. POTENTIAL DER LOECHER
SCREEN(MDE,MH,EPSO,N,T,KTF)	BERECHNET DEN ABSCHIRMWELLENVEKTOR
SPECK(O)	LOEST DIE KOMPLEXE INTEGRAL- GLEICHUNG MIT HILFE EINER MATRIX- INVERSION.
STUETZ(X,W,O)	BERECHNET DIE STUETZSTELLEN
DCMLIN(A,B,IN,IN,1,DET,V,O)	MATRIXINVERSIONSPROGRAMM; BERECHNET DIE INVERSE MATRIX EINER KOMPLEXEN MATRIX A, WOBEI DIE OPTION (1) DIE LOESUNG Z' VON A*Z=B AUF DIE MATRIX B SCHREIBT, WAEHREND (2) DIE MATRIX A DURCH IHRE INVERSE ERSETZT
XCOMP(X)	BERECHNET DEN KOMPENSATIONSTERM
DELTA(X)	BERECHNET DIE BANDKANTENRENORMIERUNG
XPOT(X,Y,Z,D)	BERECHNET DAS WINKELGENMITTELTE QUASISTATISCHE POTENTIAL
POT(X,Y,D)	BERECHNET DAS QUASIST. POTENTIAL
FF(X)	BERECHNET DIE FERMIVERTeilUNG

LIST OF CONTENTS OF DATASET UF66.GERM.FORT(GERM)

```

COMMON/GAU/X9,W9,X8,W8,X4,W4,X1,W1
COMMON XX,WX
N=XN
T=XT
LFC=XLFC
OS=XOS
DC=XDO
IO=IOX
IN=100
C MATERIALPARAMETER FUER GERMANIUM (SIEHE ANHANG A)
EG=888.4D0
EPSUN=16.8D0
EPSO=15.3D0
ME=0.037D0
MH=0.35D0
MOE=0.12D0
MDE=0.22D0
GAM=0.48D0
CONST=0.41D0
C STUETZSTELLEN UND GEWICHTE FUER GAUSS-QUADRATUR FORMELN
CALL XGAUSS(XX,WX,IN)
CALL XGAUSS(X9,W9,90)
CALL XGAUSS(X8,W8,80)
CALL XGAUSS(X4,W4,40)
CALL XGAUSS(X1,W1,10)
PI=4.D0*DATAN(1.D0)
C REDUZIERTER ELEKTRON-LOCH-MASSE
M=(ME*MH)/(ME+MH)
C EXZITON-RYDBERG
EO=M/EPSO**2*13606.D0
C BOHRRADIUS
AO=EPSO/M**0.52917D-8
C REN. BANDLUECKE
EGS=EG
IF(N.EQ.0.D0) GOTO 3
C QUASICHEMISCHES POTENTIAL
CALL XMU(MH,N,T,MUH)
MUH=MUH/EO
C TEMPERATUR
KT=0.086163D0*T/EO
C REDUZIERTER OPTISCHE MASSE
MO=MOE*MH/(MOE+MH)
MR=M/MH
C EFFEKTIVE SPP-DISPERSION LAUT GLG. (3.66)
D=M/(64.D0*PI*MO*N*AO**3)*LFC
YY(1,2)=D*(1.D0+2.D0*MO/ME/DSQRT(LFC))
YY(2,2)=D*(1.D0+2.D0*MO/MH/DSQRT(LFC))
CALL SCREEN(MDE,MH,EPSO,N,T,KTF)
C ABSCHIRMWELLENZAHL
XD=KTF*AO
OP=DSQRT(16.D0*PI*N*AO**3*M/MO)
YY(1,1)=XD/DSQRT(1.D0+(1.D0-MR)*XD**2/OP)
YY(2,1)=XD/DSQRT(1.D0+MR*XD**2/OP)
EGS=EG+DELTA(0.D0)
MU=EGS+MUH*EO
WRITE(6,1)

```

LIST OF CONTENTS OF DATASET UF66.GERM.FORT(GERM)

```

1  FORMAT(33X,'DENSITY',9X,'TEMPERATURE',8X,'REN. BANDGAP',10X,'CHEM.
1  POT.',4X,'SCREENING LENGTH'//)
2  WRITE(6,2) N,T,EGS,MU,XD
3  FORMAT(20X,5(D20.6)///)
4  WRITE(6,4)
4  FORMAT(11X,'FREQUENCY',11X,'REAL PART',6X,'IMAGINARY PART',9X,'REF
1R. INDEX',10X,'ABSORPTION',11X,'REFLEXION'//)
IF(IOUT.EQ.0) GOTO 6
J=1
WRITE(21,5) N,T,IN
WRITE(22,5) N,T,IN
WRITE(23,5) N,T,IN
WRITE(24,5) N,T,IN
WRITE(25,5) N,T,IN
5  FORMAT(2(E15.8//),I3/)
6  OM=OS-DO
DO 10 I=1,10
OM=CM+DO
C=(OM-EGS)/EO
CALL SPECX(C)
IF(IOUT.EQ.0) GOTO 9
C  DATENSPEICHERUNG
DISC1(J)=EPSRE
DISC2(J)=EPSIM
DISC3(J)=ABS
DISC4(J)=NRE
DISC5(J)=REFL
IF(J.NE.20) GOTO 8
WRITE(21,7) DISC1
WRITE(22,7) DISC2
WRITE(23,7) DISC3
WRITE(24,7) DISC4
WRITE(25,7) DISC5
7  FORMAT(20A4)
J=0
8  J=J+1
C  AUSGABEPARAMETER
9  WRITE(6,12) OM,EPSREO,EPSIMO,NREO,ABSC,REFLO
WRITE(6,13) EPSRE,EPSIM,NRE,ABS,REFL
10 WRITE(6,11) TESRE,TESIM
11 FORMAT(6X,'RELATIVE ERROR',2(D20.6))
12 FORMAT(6(D20.6))
13 FORMAT(20X,5(D20.6))
WRITE(6,14) IN
14 FORMAT(///8X,'THE DIMENSION OF THE VERTEXFUNCTION WAS N=',I4)
RETURN
END
SUBROUTINE SPECX(O)
IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z)
COMPLEX*16 A,B,Q,DET,S
DIMENSION A(100,100),B(100,1),V(100),Q(100),SELF(100)
DIMENSION X(100),W(100),YY(2,2)
DIMENSION X9(90),W9(90),X8(80),W8(80),X4(40),W4(40),X1(10),W1(10)
COMMON/INPUTO/PI,EPSO,EPSUN,GAM,EO,EG,CONST,IN
COMMON/INPUT/YY,KT,MUH,MR,N,EGS
COMMON/OUTO/EPSREO,EPSIMO,ABSO,NREO,REFLO,TESRE,TESIM

```

LIST OF CONTENTS OF DATASET UF66.GERM.FORT (GERM)

```

COMMON/OUT/EPSRE, EPSIM, ABS, NRE, REFL
*****
C LOEST DIE KOMPLEXE INTEGRALGLEICHUNG
C MIT HILFE EINER MATRIXINVERSION
C *****
C=EG/EO
C EXAKTE BERECHNUNG DES REAL- UND IMAGINAERTEILS VON Q00 OHNE
C VERTEILUNGSPUNKTIONEN LAUT GLG. (5.24)
XA=DSQRT(0.5D0*(DSQRT(O*O+GAM*GAM)+O))
XB=DSQRT(0.5D0*(DSQRT(O*O+GAM*GAM)-O))
NEN=(XA*XA+(XB+DSQRT(C))**2)**2
SUMRE=-PI*C**1.5D0/2.D0*XA*(XB+DSQRT(C))/NEN
SUMIM=PI*C**1.5D0/4.D0*(XA**2-(DSQRT(C)+XB)**2)/NEN
CALL STUETZ(X,H,O)
QUMRE=0.D0
QUMIM=0.D0
TESRE=SUMRE
TESIM=SUMIM
C BERECHNUNG DER SELBSTENERGIE
DO 5 I=1, IN
NEN=(1.D0+X(I)**2/C)*((O-X(I)**2)**2+GAM**2)
SELF(I)=(DELTA(X(I))-EGS+EG)/EO/NEN*(1.D0+X(I)**2/C)
CC=X(I)*X(I)**2/(1.D0+X(I)**2/C)
Q(I)=DCMPLX((O-X(I)**2)/NEN,-GAM/NEN)
IF(N.EQ.0.D0) GOTO 4
C VERGLEICH VON EXAKTER UND NUMERISCHER LOESUNG VON Q00
C UND BERECHNUNG VON Q00 MIT VERTEILUNGSPUNKTION
FH=FF((MR*X(I)**2-MUH)/KT)
Q(I)=Q(I)*DCMPLX(1.D0-FH,0.D0)
QUMRE=QUMRE+CC*DREAL(Q(I))
QUMIM=QUMIM+CC*DIMAG(Q(I))
TESRE=TESRE-CC/NEN*(O-X(I)**2)
TESIM=TESIM+CC/NEN*GAM
B(I,1)=DCMPLX(1.D0,0.D0)
C REAL- UND IMAGINAERTEIL VON Q00
EPSREO=EPSUN-CONST*4.D0*EPSO/PI/C*QUMRE
EPSIMO=-CONST*4.D0*EPSO/PI/C*QUMIM
NREO=DSQRT(0.5D0*(DSQRT(EPSREO**2+EPSIMO**2)+EPSREO))
ABSO=(O*EO+EGS)*50.676534D0/NREO*EPSIMO
NIMO=EPSIMO/2.D0/NREO
REFLO=((NREO-1.D0)**2+NIMO**2)/((NREO+1.D0)**2+NIMO**2)
C RELATIVER FEHLER VON Q00
TESRE=DABS(TESRE)/DABS(SUMRE)
TESIM=DABS(TESIM)/DABS(SUMIM)
DO 12 I=1, IN
IF(N.EQ.0.D0) GOTO 7
C BERECHNUNG DER DIAGONAL- UND NICHTDIAGONAL- ELEMENTE
C DER KOMPLEXEN MATRIX A
SUM=XCOMP(X(I))
GOTO 8
7 SUM=1.D0
8 DO 9 IK=1, IN
C SUMMATION DES KOMPENSATIONSTERMS LAUT GLG. (5.14)
CC=(X(I)/PI)**3*W(IK)/(X(I)**2+X(IK)**2)
IF(IK.NE.I) SUM=SUM-CC*0.5D0*(XPOT(X(I),X(IK),YY(1,1),YY(1,2))+
1XPOT(X(I),X(IK),YY(2,1),YY(2,2)))

```

LIST OF CONTENTS OF DATASET UF66.GERM.FORT (GERM)

```

DO 11 J=1, IN
IF (J.NE.1) GOTO 10
BERECHNUNG DER DIAGONAL- ELEMENTE
C CC=(1.DO+X(I)**2/C)*PI*X(I)*SUM
A(I,J)=DCMLPX(1.DO,0.DO)+Q(I)*DCMLPX(CC,0.DO)-DCMLPX(SELFI(I),0.DO)
1*DCMLPX(0-X(I)**2,-GAM)
GOTO 11
C BERECHNUNG DER NICHTDIAGONAL- ELEMENTE
10 CC=(1.DO+X(I)**2/C)*(X(J)/PI)**2/2.DO*W(J)*0.5DO*(XPOT(X(I),X(J),
1YY(1,1),YY(1,2))+XPOT(X(J),X(I),YY(2,1),YY(2,2)))
C REAL- UND IMAGINAEERTEIL DER MATRIX A
A(I,J)=DCMLPX(CC,0.DO)*Q(J)
11 CONTINUE
12 CONTINUE
C MATRIXINVERSION NACH DEM GAUSSCHEN-ELIMINATIONSVERFAHREN
CALL DCMLIN(A,B,IN,IN,1,DET,V,0)
S=DCMLPX(0.DO,0.DO)
DO 13 I=1, IN
C SUMMATION UEBER DIE INVERSE MATRIX A LAUT GLG. (5.18)
CC=W(I)*X(I)**2/(C+X(I)**2)
13 S=S+Q(I)*DCMLPX(CC,0.DO)*(B(I,1)-DCMLPX(1.DO,0.DO))
C REAL- UND IMAGINAEERTEIL VON Q LAUT GLG. (5.27), DARAUSS FOLGEN
C BRECHUNGSINDEX, ABSORPTIONS- UND REFLEXIONSKOEFFIZIENT
EPSRE=EPSREO-4.DO*EPSO/PI*CONST*DREAL(S)
EPSIM=EPSIMO-4.DO*EPSO/PI*CONST*DIMAG(S)
NRE=DSQRT(0.5DO*(DSQRT(EPSRE**2+EPSIM**2)+EPSRE))
ABS=(C*EO+EGS)*50.676534DO/NRE*EPSIM
NIM=EPSIM/2.DO/NRE
REFL=((NRE-1.DO)**2+NIM**2)/((NRE+1.DO)**2+NIM**2)
RETURN
END
SUBROUTINE STUETZ(X,W,0)
IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z)
DIMENSION YY(2,2),X(100),W(100),XX(100),WX(100)
DIMENSION X9(90),W9(90),X8(80),W8(80),X4(40),W4(40),X1(10),W1(10)
COMMON/INPUTO/PI,EPSO,EPSON,GAM,EO,EG,CONST,IN
COMMON/INPUT/YY,KT,MJE,MUH,MR,N,EGS
COMMON/GAU/X9,W9,X8,W8,X4,W4,X1,W1
COMMON XX,WX
C *****
C BERECHNET DIE STUETZSTELLEN UND GEWICHTE (S. TEXT AUF SEITE 60)
C *****
IF (O.GT.-GAM) GOTO 2
DO 1 I=1, IN
X(I)=1.DO/DSQRT(XX(I)**3)-1.DO
1 W(I)=1.5DO*WX(I)/DSQRT(XX(I)**5)
RETURN
2 WOP=DSQRT(O+GAM)
IF (O.GT.0.DO) GOTO 4
DO 3 I=1, IN
IF (I.LE.10)
3 X(I)=WOP*X1(I)
IF (I.LE.10)
W(I)=WOP*W1(I)
IF (I.GT.10)
X(I)=1.DO/DSQRT(X9(I-10)**3)-1.DO+WOP
IF (I.GT.10)
W(I)=1.5DO*W9(I-10)/DSQRT(X9(I-10)**5)
RETURN
4 WO=DSQRT(O)

```

LIST OF CONTENTS OF DATASET UP66.GERM.FORT(GERM)

```

IF (O.GT.GAM) GOTO 6
DO 5 I=1, IN
IF (I.LE.10)
IF (I.LE.10)
IF (I.GT.10.AND.I.LE.20)
IF (I.GT.10.AND.I.LE.20)
5 IF (I.GT.20)
IF (I.GT.20)
RETURN
6 WOH=DSQRT(O-GAM)
DO 7 I=1, IN
IF (I.LE.40)
IF (I.LE.40)
IF (I.GT.40.AND.I.LE.50)
IF (I.GT.40.AND.I.LE.50)
IF (I.GT.50.AND.I.LE.60)
IF (I.GT.50.AND.I.LE.60)
7 IF (I.GT.60)
IF (I.GT.60)
RETURN
END
X(I)=WO*X1(I)
W(I)=WO*W1(I)
X(I)=(WOP-WO)*X1(I-10)+WO
W(I)=(WOP-WO)*W1(I-10)
X(I)=1.D0/DSQRT(X8(I-20)**3)-1.D0+WOP
W(I)=1.5D0*W8(I-20)/DSQRT(X8(I-20)**5)
X(I)=WOH*X4(I)
W(I)=WOH*W4(I)
X(I)=(WO-WOH)*X1(I-40)+WOH
W(I)=(WO-WOH)*W1(I-40)
X(I)=(WOP-WO)*X1(I-50)+WO
W(I)=(WOP-WO)*W1(I-50)
X(I)=1.D0/DSQRT(X4(I-60)**3)-1.D0+WOP
W(I)=1.5D0*W4(I-60)/DSQRT(X4(I-60)**5)

```

REFERENZEN

- [1] S. Schmitt-Rink, Doktorarbeit, Frankfurt 1982

- [2] H. Haug und D.B. Tran Thoai,
Phys. Stat. Sol. (b)98, 581 (1978)
D.B. Tran Thoai, Doktorarbeit, Frankfurt 1978

- [3] S. Schmitt-Rink, D.B. Tran Thoai und H. Haug
Z. Physik B39, 25 (1980) und
Sol. State Comm. 36, 381 (1980)

- [4] R.S. Knox, Theory of Excitons,
Solid State Physics 5, 1 (1963)

- [5] R.J. Elliot, Theory of Excitons I,
Academic Press, New-York 1963

- [6] H. Haken, Theory of Excitons II,
Academic Press, New-York 1963

- [7] C. Klingshirn und H. Haug, Optical Properties of
Highly Excited Direct Gap Semiconductors,
Physics Reports 70, 315 (1981)

- [8] E.O. Göbel und G. Mahler, Advances in Solid State
Physics XIX, 105 (1979)

- [9] R. Luzzi und L.C. Miranda. Optical Properties of Semiconductors under intense Laser Fields, Physics Reports 43C, 423 (1978)

- [10] R.J. Elliot und Haken, Excitons and Polarons, Edinburgh 1963

- [11] H. Haken und S. Nikitine, Excitons at High Density. Springer Tracts in Modern Physics, Springer Verlag 1975

- [12] N.F. Mott, Metal-Insulator Transitions, New-York 1974
 N.F. Mott, Rev. Mod. Phys. 40, 677 (1968)
 N.F. Mott, Phil. Mag. B 37, 377 (1978)

- [13] T.M. Rice, Solid State Physics 32, 1 (1977)
 J.C. Hensel, T.G. Philipps und C.A. Thomas, ibid

- [14] E.O. Göbel, Appl. Phys. Lett. 24, 492 (1974)
 D. Hildebrand, B. Faltermeyer und M.H. Pilkuhn, Sol. State Comm. 19, 841 (1976)
 R.F. Leheny und J. Shah, Phys. Rev. Lett. 37, 871 (1976)
 K. Bohnert, G. Schmieder, S. El-Dessouki und C. Klingshirn, Sol. State Comm. 27, 295 (1978)

- [15] K. Bohnert, M. Anselment, G. Koppe, C. Klingshirn, S.W. Koch, S. Schmitt-Rink und F.F. Abraham, Z. Physik B42, 1 (1981)

- [16] E.O. Göbel, Habilitation, Karlsruhe 1981
- [17] K. Bohnert, Doktorarbeit, Stuttgart 1979
- [18] O. Hildebrand, Doktorarbeit, Stuttgart 1977
- [19] G. Mahler, Habilitation, Stuttgart 1977
- [20] O. Hildebrand, E.O. Göbel, K.M. Romanek, H. Weber
und G. Mahler, Phys. Rev. B17, 4775 (1978)
- [21] K.M. Romanek, Doktorarbeit, Stuttgart 1981
- [22] A. Miller, D.A.B. Miller und S.D. Smith, Dynamic
Non-Linear Optical Processes in Semiconductors,
Advances in Physics 30, 697 (1981)
H. Haug, Advances in Solid State Physics
XXII, 149 (1982)
- [23] B. Höhnerlage, J.Y. Bigot und R. Levy,
wird veröffentlicht
S.W. Koch und H. Haug, Phys. Rev. Lett. 46, 450 (1981)
- [24] C. Klingshirn und K. Bohnert, wird veröffentlicht
- [25] J. Shah und R.F. Leheny und W. Wiegmann,
Phys. Rev. B16, 1577 (1977)
- [26] E.O. Göbel, P.H. Liang und D.v.d. Linde,
Sol. State Comm. 37, 609 (1981)

- [27] J.G. Gay., Phys. Rev. B4, 2567 (1971)

- [28] R.G. Ulbrich in Optical Bistability II,
ed. by C. Bowden et al., Plenum Press, New-York 1983
G.W. Fehrenbach, W. Schäfer, J. Treusch und
R.G. Ulbrich, Phys. Rev. Lett. 49, 1281 (1982)

- [29] E. Hanamura und H. Haug,
Condensation Effects of Excitons,
Physics Reports 33C, 209 (1977)

- [30] R.F. Leheny, J. Shah, G.C. Chiang,
Sol. State Comm. 25, 621 (1978)

- [31] S. Schmitt-Rink, J.P. Löwenau, H. Haug,
A. Kreissl, K. Bohnert, A. Kempf und C. Klingshirn,
Proc. 16th Int. Conf. Phys. Semicon. Montpellier 1982

- [32] G.O. Müller, H.H. Weber und
I. Höricke, Phys. Stat. Sol. (b)91, 531 (1979)

- [33] E. Abraham, S.D. Smith,
Rep. Prog. Phys. 45,815 (1982)

- [34] Optical Bistability, ed. C.M. Bowden, M. Ciftan and
H.R. Robl, Plenum Press, New-York 1981

- [35] H.M. Gibbs, S.L. McCall, T.N.C. Venkatesan,
A.C. Gossard, A. Passner und W. Wiegmann,
Phys. Rev. Lett. 35, 451 (1979)

- [36] D.A.B. Miller, S.D. Smith und A. Johnston,
Appl. Phys. Lett. 35, 658 (1979)

- [37] H.M. Gibbs, S.L. McCall, T.N.C. Venkatesan,
Phys. Rev. Lett. 36, 1135 (1979)
In Optical Bistability II, ed. by C. Bowden et al.,
Plenum Press, New-York, in Press
S.A. Collins und P. Wasmundt,
Opt. Engng. 19, 478 (1980)
J.D. Farina, L.M. Narducci, J.M. Juan und
L.A. Lugiato, Opt. Engng. 19, 469 (1980)
G. Staupendahl und K. Schindler, Optical and
Quantum Electronics 14, 157 (1982)

- [38] D.A.B. Miller, S.D. Smith und S.T. Seaton,
IEEE Quantum Electronics 17, 306 (1981)
A. Miller, D.A.B. Miller und S.D. Smith,
Advances in Physics 30, 697 (1981)

- [39] D.N. Zubarev, Nonequilibrium Statistical
Thermodynamics, Consultant Bureau, New-York 1974

- [40] J. Callaway, Quantum Theory of the
Solid State, Academic Press, New-York 1974

- [41] W. Brauer, Einführung in die Elektronentheorie
der Metalle, Akademische Verlagsgesellschaft,
Leipzig 1972

- [42] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov und

I.Ye. Dzyaloshinskii, Quantum Field Theoretical Methods
in Statistical Physics, Pergamon Press, London 1965

- [43] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, Lehrbuch der
Theoretischen Physik III, Quantenmechanik,
Akademie Verlag, Berlin 1975
- [44] G.D. Mahan, Many-Particle Physics,
Plenum Press, New-York 1981
- [45] H. Stolz, Einführung in die Vielelektronentheorie
der Kristalle, Akademie Verlag, Berlin 1974
R. Zimmermann, in Hochangeregte Halbleiter,
Veröffentlichungen des Zentralinstituts
für Elektronenphysik der Akademie der
Wissenschaften der DDR, Berlin 1980
- [46] L.J. Sham und T.M. Rice, Phys. Rev. 144, 708 (1966)
- [47] H. Stolz, in Hochangeregte Halbleiter,
Veröffentlichungen des Zentralinstituts
für Elektronenphysik der Akademie der
Wissenschaften der DDR, Berlin 1980
- [48] D. Pines und P. Nozieres,
The Theory of Quantum Liquids,
W.A. Benjamin Inc., New-York 1966
- [49] L.P. Kadanoff und G. Baym, Quantum Statistical
Mechanics, W.A. Benjamin Inc., New-York 1982

- [50] H. Puff, in Hochangeregte Halbleiter,
Veröffentlichungen des Zentralinstituts
für Elektronenphysik der Akademie der
Wissenschaften der DDR, Berlin 1979
- [51] H.B. Singh, S. Schmitt-Rink und H. Haug,
Phys. Rev. B24, 7304 (1981)
- [52] R.J. Elliot, Phys. Rev. 108, 1384 (1957)
- [53] R. Zimmermann, Phys. Stat. Sol. (b)86, K63 (1978)
- [54] D. Pines, The Many Body Problem,
W.M. Benjamin Inc., New-York 1961
D. Pines, Elementary Excitations in Solids, *ibid.*,
New-York 1963
- [55] W.F. Brinkmann und R.A. Lee,
Phys. Rev. Lett. 31, 257 (1973)
- [56] R. Zimmermann, K. Kilimannn, W.D. Kraeft,
D. Kremp und G. Röpke,
Phys. Stat. Sol. b(90), 175 (1978)
- [57] C. Comte und P. Nozieres
J. Physique 43, 1069 (1982); 1083 (1982)
- [58] D.C. Langreth, Phys. Rev. 181, 753 (1969)
K. Shindo, J. Phys. Soc. Jpn 29, 287 (1970)

- [59] H. Haken, Polarons and Excitons,
ed. C.G. Kuper and G.D. Whitfield,
Olyver and Boyd, Edinburgh 1963
- [60] K.K. Bajaj, Sol. State Comm. 52, 195 (1972)
- [61] A.W. Overhauser, Phys. Rev. B3, 1888 (1971)
- [62] F. Brosens, L.F. Lemmens und J.T. Devreese,
Phys. Stat. Sol. (b)81, 551 (1977)
- [63] K.S. Singwi und M.P. Tosi
Sol. State Phys. 36, 177 (1981)
- [64] A.A. Kugler, J. Statist. Phys. 12, 35 (1975)
- [65] K.Dan. Lindhard, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.
NO 8, 28 (1974)
- [66] L. Lanto, P. Pietilaenen und
A. Kallio, Phys. Rev. B26, 5568 (1982)
- [67] L.J. Sham, Phys. Rev. B7, 4357 (1973)
A.K. Rajagopal, Phys. Rev. A6, 1239 (1972)
- [68] D.J.W. Geldart und R. Taylor,
Can. J. Phys. 48, 155 (1970)
- [69] G. Niklasson, Phys. Rev. B10, 3052 (1974)
- [70] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London Ser.

A 243, 336 (1957)

D.J.W. Geldart und S.H. Voske,

Can. J. Phys. 44, 2137 (1966);

48, 155 (1970); 48, 167 (1970)

F. Toigo und T.O. Woodruff,

Phys. Rev. B2, 3958 (1970); B4, 371 (1971)

K.S. Singwi, M.P. Tosi, R.H. Land und

A. Sjölander, Phys. Rev. 176, 589 (1968)

P. Vashista und K.S. Singwi, Phys. Rev. B6, 875 (1972)

[71] F. Toigo und T.O. Woodruff,

Phys. Rev. 4, 371 (1971)

[72] P. Nozieres und D. Pines,

Nuovo Cimento 9, 470 (1958)

[73] H.H. Kranz, J.P. Löwenau und S. Schmitt-Rink,

J. Phys. C, eingereicht

[74] D.N. Tripaty und S.S. Mandal,

Phys. Rev. B16, 231 (1977)

[75] A. Holas, P.K. Aravind und K.S. Singwi,

Phys. Rev. B20, 4912 (1979)

[76] F. Brosens, J.T. Devreese und L.F. Lemmens,

Phys. Rev. B21, 1363 (1980)

[77] A.W. Overhauser,

Phys. Rev. 128, 1437 (1962)

- [78] P.A. Fedders und P.C. Martin,
Phys. Rev. 143, 245 (1966)
- [79] D.R. Hamann und A.W. Overhauser,
Phys. Rev. 145, 908 (1967)
- [80] S. Schmitt-Rink, J.P. Löwenau und H. Haug,
Z. Physik B47, 13 (1982)
- [81] S. Schmitt-Rink, Private Mitteilung
- [82] R. Zimmermann, M. Rösler und V.M. Asnin,
Phys. Stat. Sol. (b)107, 579 (1981)
- [83] D. Dunn, Sol. State Phys. 10, 2801 (1977)
- [84] V.I. Krylow, Approximate Calculations
of Integrals, New-York 1962
A.H. Stroud und D. Secrest, Gaussian Quadratur
Formulas, Prentice-Hall, Inc., 1966
- [85] Cern Computer Centre,
Library Catalog NO. F413, 12 (1978)
- [86] J.P. Löwenau, S. Schmitt-Rink und H. Haug,
Phys. Rev. Lett. 49, 1511 (1982)
- [87] T.S. Moss, Phys. Stat. Sol. (b)101, 555 (1980)
- [88] P. Lavallard, R. Bichard und
C. Benoit a la Guillaume,

Phys. Rev. B16, 2804 (1977)

- [89] O. Hildebrand und E.O. Göbel, Proc. XIII. Int. Conf. Phys. Semicon., Rome 1976, P.942
- [90] G.W. Gobeli und H.Y. Fan,
Phys. Rev. 119, 613 (1960)
- [91] S.W. Koch, S. Schmitt-Rink und H. Haug
Phys. Stat. Sol. (b)106, 135 (1981)
- [92] D.A.B. Miller, C.T. Seaton, M.E. Price und
S.D. Smith, Phys. Rev. Lett. 47, 197 (1981) und
private Communication
- [93] A.K. Kar, J.G.H. Mathew, S.D Smith, B. Davis und
W. Prettl, Appl. Phys. Lett. 42, 334 (1983)
- [94] H.M. Gibbs, S.S.Tarng, J.L. Jewell,
D.A. Weinberger, K. Tai, A.C. Gossard, S.L. McCall,
A. Passner und W. Wiegmann,
Appl. Phys. Lett. 41, 221 (1982)
- [95] K.M. Romanek, H. Nather, J. Fischer und
E.O. Göbel, J. Lumin. 24/25, 585 (1981)
- [96] A. Forchel, B. Lambrich, W. Schmid, G. Maier und
G. Mahler, J. Lumin. 24/25, 565 (1981)
- [97] D. Ulin, A. Antonelli, L.L. Chase, J.L. Marin,
A. Migus und A. Mysyrowicz,

Optics Comm. 41, 178 (1982)

- [98] W. Graudszus und E.O. Göbel,
Proc. 16th Int. Conf. Phys. Semicond.,
Montpellier 1982

- [99] J.P. Löwenau, S. Schmitt-Rink, H. Haug
L.L. Chase und A. Mysyrowicz,
Phys. Rev. Lett. , wird veröffentlicht

- [100] H.M. Gibbs, A.C. Gossard, S.L. McCall,
A. Passner, W. Wiegmann und T.N.C. Venkatesan,
Sol. State Comm. 30, 271 (1978)

- [101] J.S. Blakemore, Semiconductor Statistics,
Pergamon Press, New-York 1962

- [102] H. Haug und F.F. Abraham,
Phys. Rev. B23, 2960 (1981)

- [103] F. Urbach, Phys. Rev. 92, 1324 (1953)
W. Martienssen, J. Phys. Chem. Solids
2, 257 (1957)
B. Thomas, Doktorarbeit, Frankfurt 1980

- [104] A. Haug, Theoretical Solid State Physics,
Pergamon Press, New-York 1972

- [105] D.v.d. Linde, R. Lambrich,
Phys. Rev. Lett. 42, 1090 (1979)
D.v.d. Linde, J. Kuhl, E. Rosengart,

Picosecond Phenomena III, Springer Verlag,
New-York, in Press

- [106]G.A. Thomas, J.B. Mock, M. Capizzi,
Phys. Rev. B18, 4250 (1978)
- [107]J. Shah, M. Compescot, A.H. Dayem,
Phys. Rev. Lett. 38, 1497 (1977)
- [108]G.A. Thomas, Nuovo Cimento 39B, 561 (1977)
- [109]C.V. Shank, R.L. Fork, R.F. Leheny und
J. Shah, Phys. Rev. Lett. 42, 112 (1979)
- [110]H. Schweizer, A. Forchel, A Hangleitner,
S. Schmitt-Rink, J.P. Löwenau und H. Haug,
Phys. Rev. Lett., wird veröffentlicht
- [111]F.J. Rogers; H.C. Graboske und G.J. Harwood,
Phys. Rev. 11, 1577 (1970)
- [112]G. Beni und T.M. Rice,
Phys. Rev. B18, 768 (1973)

Herrn Prof. Dr. H. Haug danke ich für die Aufnahme in sein Institut, die Anregung zu dieser Arbeit und für sehr viele wertvolle Ratschläge, Hinweise und Diskussionen.

Bei allen Angehörigen unseres Instituts, insbesondere bei Herrn Dr. S. Schmitt-Rink, bedanke ich mich für viele wertvolle Hinweise und die gute Zusammenarbeit.

Diese Arbeit entstand als Teilprojekt des Sonderforschungsbereiches 65 " Festkörperspektroskopie " und wurde in diesem Rahmen von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) finanziell unterstützt.

Für die numerischen Rechnungen stand mir Rechenzeit auf der Computeranlage der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt zur Verfügung.

Für das Schreiben des Manuskripts und das Anfertigen der Zeichnungen danke ich Frau Pfannkuch und Frau Boffo.

LEBENS LAUF

Jan-Peter Löwenau, geb. am 30.1.1950

Heiligenhafen/Schleswig-Holstein

1956-1964 Grundschule in Langenlonsheim/Rheinland-Pfalz

1964-1967 Werkzeugmacherlehre

1969-1970 Wehrdienst

1971-1974 Maschinenbaustudium in Frankfurt

1973-1976 Besuch des Johann Wolfgang Goethe-Gymnasiums
in Frankfurt

1976 Abitur

1976 Aufnahme des Studiums der Physik an der
Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt

1980 Abschluß der Diplomarbeit am Institut für
theoretische Physik bei Prof. Dr. H. Haug.
Thema: Dynamik der Bildung und des Zerfalls von
Elektron-Loch-Tropfen in Germanium

1980 Beginn der Promotion bei Prof. Dr. H. Haug am
Institut für theoretische Physik in Frankfurt

Meine akademischen Lehrer waren die Professoren:
Haug, Martienssen, Mohler, Dreizler, Gerhard und
Constantinescu

